

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Актуализировано:
на заседании кафедры
протокол №8 от «07» июня 2017 г.
Зав. _____ /Мустафин А.Г.
кафедрой

Согласовано:
Председатель УМК химического фа-
культета
_____ /Гарифуллина Г.Г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Основы теоретической термодинамики

Б1.В.ДВ.07.01 Вариативная часть, дисциплина по выбору

программа бакалавриата

Направление подготовки
04.03.01 Химия

Профиль подготовки
Физическая химия

Физическая химия с углубленным изучением английского языка

Квалификация
бакалавр

Разработчик (составитель)
доцент, д.х.н., доцент _____

_____ / Хайруллина В.Р.
(подпись, Фамилия И.О.)

Для приема: 2015 г.

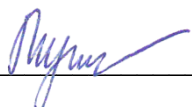
Уфа 2017 г.

Составитель / составители: Хайруллина В.Р., д.х.н., доцент, доцент кафедры физической химии и химической экологии.

Рабочая программа дисциплины актуализирована на заседании кафедры физической химии и химической экологии, протокол № 8 от «07» июня 2017 г.

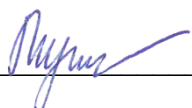
Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины (обновлены перечень основной и дополнительной литературы и лицензионное программное обеспечение, необходимое для освоения дисциплины), приняты на заседании кафедры физической химии и химической экологии, протокол № 11 от 01.06.2018 г.

Заведующий кафедрой

 / Мустафин А.Г.

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины (обновлены перечень основной и дополнительной литературы и лицензионное программное обеспечение, необходимое для освоения дисциплины), приняты на заседании кафедры физической химии и химической экологии, протокол № 6 от 22.04.2019 г.

Заведующий кафедрой

 / Мустафин А.Г.

Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	4
2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы	5
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)	5
4. Фонд оценочных средств по дисциплине	5
4.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания	5
4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций	12
4.3. Рейтинг-план дисциплины (при необходимости)	16
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	16
5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	16
5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины	18
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	19

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

В результате освоения образовательной программы обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Результаты обучения		Формируемая компетенция (с указанием кода)	При мечание
Знания	Знать: теоретические основы базовых химических дисциплин	ОПК-1 способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	
	Знать: стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	ОПК-2 владением навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	
	Знать: основные методы синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов.	ПК-1 способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	
	Знать: стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	ПК-2 владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	
Умения	Уметь: выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин Уметь: решать типовые учебные задачи по основным (базовым) химическим дисциплинам	ОПК-1 способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	
	Уметь: проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам	ОПК-2 - владением навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	
	Уметь: выполнять основные операции выполняемые при синтезе и анализе химических соединений	ПК-1 способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	
	Уметь: проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	ПК-2 владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	
Владения	Владеть: навыками работы с учебной литературой по основным химическим дис-	ОПК-1 способностью использовать полученные знания	

(навыки / опыт деятельности)	циплинам	теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	
	Владеть базовыми навыками проведения химического эксперимента и оформления его результатов	ОПК-2 владением навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	
	Владеть: навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам	ПК-1 способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	
	Владеть базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	ПК-2 владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	

2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы

Цель дисциплины – дать студентам инструмент для анализа закономерностей протекания химических реакций, основанный на всеобщности основных законов природы, таких как закон сохранения энергии, второй закон термодинамики и т.д. В задачи курса входит научить студентов способам оценки энергетических характеристик химических соединений для грамотного анализа возможности протекания химического процесса; привить студентам навыки физико-химической культуры исследования.

Дисциплина «Теоретические основы термохимии» относится к дисциплине по выбору вариативной части образовательной программы.

Дисциплина изучается на 4-м курсе в 8-ом семестре.

Для освоения дисциплины необходимы компетенции, сформированные в рамках изучения следующих дисциплин «Физическая химия», «Неорганическая химия», «Органическая химия», «Аналитическая химия», «Строение вещества». Для усвоения дисциплины требуется владение операциями дифференцирования (в том числе с частными производными), интегрирования, методами решения простых обыкновенных дифференциальных уравнений. Студент должен иметь представление о термохимии реакции, строении вещества, квантовой химии, фазовых переходах и общих закономерностях химических процессов.

3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)

Содержание рабочей программы представлено в Приложении 1.

4. Фонд оценочных средств по дисциплине

4.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Код и формулировка компетенции

ОПК-1 способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач

Уровень освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		не зачтено	зачтено
Первый этап (уровень)	Знать: теоретические основы базовых химических дисциплин	Затрудняется в определении базовых понятий и формулировке основных законов химии	Имеет четкое, целостное представление о содержании основных химических курсов и общих закономерностях химических процессов, изучаемых в рамках основных химических дисциплин
Второй этап (уровень)	Уметь: выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин	Не умеет	Умеет прогнозировать результаты несложных последовательностей химических реакций с учетом общих закономерностей процессов, изучаемых в рамках основных химических дисциплин
	Уметь: решать типовые учебные задачи по основным (базовым) химическим дисциплинам	Не умеет	Умеет решать задачи повышенной сложности из базовых курсов химии
Третий этап (уровень)	Владеть: навыками работы с учебной литературой по основным химическим дисциплинам	Не владеет	Владеет навыками критического анализа учебной информации по основным разделам химии, формулировки выводов и участия в дискуссии по учебным вопросам

Код и формулировка компетенции

ОПК-2 владением навыками проведения химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций

Уровень освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		не зачтено	зачтено
Первый этап (уровень)	Знать: стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	Затрудняется в выборе метода получения, идентификации и исследования свойств указанного вещества, не знает требований к оформлению результатов эксперимента и норм ТБ	Знает стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств различных групп веществ и материалов; правила техники безопасности при работе с ними, основные требования к оформлению результатов эксперимента
Второй этап (уровень)	Уметь: проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам	Не умеет	Умеет выполнять демонстративные опыты по химии; одно- и двухстадийный синтез по предлагаемой методике с выходом целевого продукта согласно заявленному в методике; проводить комплексный анализ и исследование свойств полученных веществ и материалов. Умеет оформлять результаты эксперимента в соответствии с заявленными требованиями
Третий этап (уровень)	Владеть базовыми навыками проведения химического эксперимента и оформления его результатов	Не владеет	Владеет навыками синтеза, идентификации и изучения свойств веществ и материалов, правильного протоколирования опытов

ПК- 1 Способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено
Первый	Знание основ-	Фрагментар-	Сформированные сис-

этап (уровень)	ных методов анализа свойства химических веществ, принципа работы приборов.	ные представления о методах работы в лаборатории	тематические знания о методах синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов.
Второй этап (уровень)	Умение выполнять основные операции при анализе химических соединений	Фрагментарное умение выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	Успешное и систематическое умение выполнять стандартные операции.
Третий этап (уровень)	Владение навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам	Фрагментарное владение навыками работы на стандартном оборудовании	Успешное и систематическое владение навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам

ПК-2 Владение базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено
Первый этап (уровень)	Знание стандартных методов применения современной аппаратуры при проведении научных исследований свойств веществ и материалов	Затрудняется в выборе метода применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, не знает требований к оформлению результатов эксперимента и норм ТБ	Знает стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований; правила техники безопасности при работе с ними, основные требования к оформлению результатов эксперимента
Второй этап (уровень)	Умение проводить основные теоретические вычисления с использованием современной аппаратуры	Умеет проводить некоторые теоретические вычисления с использованием современной аппаратуры	Умеет выполнять теоретические вычисления с использованием современной аппаратуры без ошибок
Третий этап (уровень)	Владение базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Владеет некоторыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Владеет базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и изучения свойств веществ и материалов, правильного протоколирования опытов

4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Результаты обучения		Формируемая компетенция (с указанием кода)	Оценочные средства
1-й этап Знания	Знать: теоретические основы базовых химических дисциплин	ОПК-1 способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	тестирование, реферат, контрольная работа, решение типовых задач, коллоквиум
	Знать: стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	ОПК-2 владением навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	
	Знать: основные методы синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов.	ПК-1 способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	
	Знать: стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	ПК-2 владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	
2-й этап Умения	Уметь: выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин Уметь: решать типовые учебные задачи по основным (базовым) химическим дисциплинам	ОПК-1 способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	
	Уметь: проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам	ОПК-2 - владением навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	
	Уметь: выполнять основные операции выполняемые при синтезе и анализе химических соединений	ПК-1 способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	
	Уметь: проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	ПК-2 владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении на-	

		учных исследований	
3-й этап	Владеть: навыками работы с учебной литературой по основным химическим дисциплинам	ОПК-1 способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	тестирование, реферат, контрольная работа, решение типовых задач, коллоквиум
	Владеть базовыми навыками проведения химического эксперимента и оформления его результатов	ОПК-2 владением навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	
	Владеть: навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам	ПК-1 способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	
	Владеть базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	ПК-2 владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	

Вопросы к коллоквиуму

1. Основы квантовой химии. Общие сведения. Современные возможности квантовой химии.
2. Свойства молекул и реакций, которые можно рассчитать квантовохимическими методами (энергия и структура молекул, энергия и структура переходных состояний, частоты колебаний, ИК и КР спектры, атомные заряды и дипольные моменты, ЯМР свойства, термодинамические функции газов: энтропия, теплоемкость, приведенная энергия Гиббса и изменение энтальпии; термохимические свойства: энергии атомизации, энтальпии образования, энтальпии реакции, энергии разрыва связей, потенциалы ионизации, сродство к электрону и протону; моделирование пути реакции: определение переходных структур и продуктов реакции, поверхности потенциальной энергии, энергий активации, константы скорости; моделирование систем в растворах и др.).
3. Метод валентных связей.
4. Метод молекулярных орбиталей.
5. Методы теории функционала плотности.
6. Полуэмпирические методы.
7. Метод молекулярной механики.
8. Программы квантово-химических расчетов. Структура программ. Схема работы квантово-химической программ. Ввод исходных данных для квантово-химических расчетов. Методы и программы.
9. Комплекс программ Gaussian. Визуализация результатов расчета с помощью программы GausView. Спецификация молекул.
10. Оптимизация геометрии молекулы.
11. Анализ заселенностей по Малликену.
12. Сканирование поверхности потенциальной энергии.
13. Оптимизация геометрии и определение стабильных конформеров молекулы и переходных состояний – основа квантовохимических расчетов. Создание входных (INPUT) файлов. Описание геометрии молекул различной симметрии с помощью Z-матриц.
14. Расчет термодинамических функций (энтропии, теплоемкости, изменения энтальпии и приведенной энергии Гиббса) газообразных соединений методом статистической термодинамики. Приближение «жесткий ротатор – гармонический осциллятор».
15. Использование экспериментальных молекулярных постоянных для расчета термодинамических функций. Сравнение экспериментальных и рассчитанных значений энтропии и теплоемкости.
16. Использование при расчете термодинамических функций молекулярных постоянных, рассчитанных квантовохимическими методами.

17. Масштабирование гармонических частотколебаний. Учет оптической изомерии. Примеры расчетов термодинамических функций, сравнение с экспериментом.

18. Значения энтропии, теплоемкости и изменения энтальпии, получаемые из выходного (OUTPUT) файла программы Gaussian.

19. Параметры INPUT файла, позволяющие рассчитать значения термодинамических функций при различных температурах, а также использовать заданный масштабирующий множитель для частот колебаний.

20. Нахождение значений масштабирующих множителей из литературы и базы данных NIST. Коррекция значений энтропии для молекул с оптической изомерией.

21. Выбор квантовохимического метода и набора базисных функций для расчета термодинамических функций.

22. Неэмпирические (ab initio) методы и метод теории функционала плотности (DFT). Исследование химических реакций. Вычисление энтальпии реакции и энергии Гиббса. Волновые функции атомных орбиталей. Установка нестандартного пути вычислений.

23. Приближенный метод вычисления термодинамических функций веществ с элементами статистического расчета. Расчет равновесных смесей изомеров или конформеров через их мольные доли и термодинамические функции отдельных конформеров с введением для энтропии и энергии Гиббса поправок на смешение (метод Питцера-Астона).

24. Расчет равновесного состава конформеров на основе рассчитанных значений относительных энергий и энтропий. Поправки на колебания при 0 К и термические поправки. Приближенный учет энтропийного фактора при расчете равновесного состава. Расчет константы равновесия через изменение энергии Гиббса и через статистические суммы по состояниям.

25. Метод расчета энтальпии образования газообразного вещества на основе энергии атомизации. Основные соотношения. Энтальпия образования вещества из элементов в стандартных состояниях при 0 К и при 298 К. Величины, определяемые из теоретического расчета: энергии атомов, энергия молекулы, поправка на колебания при 0 К (zero point energy correction) и термическая поправка. Расчет энергии атомов. Использование экспериментальных величин энтальпии образования атомов при 0 К и термических поправок для элементов в их стандартных состояниях.

26. Точность различных квантовохимических методов при расчете энтальпий образования. Достижение термохимической точности (~ 4 кДж/моль) при использовании теории высокого уровня (методы CCSD(T), QCISD(T) и CISD с корреляционно-согласованными базисными наборами).

27. Расчеты энтальпий образования небольших молекул. Аппроксимационные методы для точных расчетов энтальпии образования (Weizmann theory, Complete Basis Set theory, Gaussian theory).

28. Методы семейства Gaussian-n (G1, G2, G3, G3X, G4). Основная идея методов и их тестирование на экспериментальных значениях энтальпий образования и других термохимических величинах. Сравнение результатов расчета энтальпий образования методом G4 с экспериментальными данными. Учет конформационного состава при расчете энтальпий образования.

29. Расчет энергии разрыва связи из энтальпии образования молекулы и энтальпий образования радикалов, образующихся при разрыве данной связи. Особенности расчета молекул с открытой электронной оболочкой. Методы, разработанные для расчета энтальпий образования радикалов.

30. Расчет энергий ионизации, сродства к электрону и протону. Расчет энтальпий образования ионов. Оценка энтальпий испарения и сублимации на основе расчета энтальпий образования газообразных соединений.

Критерии оценки (в баллах) коллоквиума

- 0 баллов выставляется студенту, если студент не имеет представления об обсуждаемом разделе дисциплины;

- 1-5 баллов выставляется студенту, если студент имеет фрагментарные представления об обсуждаемом разделе дисциплины;

- 6-8 баллов выставляется студенту, если студент имеет неполные представления об обсуждаемом разделе дисциплины;
- 9-11 баллов выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие существенные пробелы представления об обсуждаемом разделе дисциплины;
- 12-14 баллов выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления об обсуждаемом разделе дисциплины;
- 15 баллов выставляется студенту, если студент имеет сформированные систематические представления об обсуждаемом разделе дисциплины.

Комплект заданий для контрольной работы по дисциплине Основы теоретической термодинамики

Пример контрольной работы

Вариант 1

1. С использованием правила аддитивности свойств связей вычислите C_p^0 , S^0 , ΔH_f^0 для молекулы 2-метил-бутана при температуре 298 К и давлении, равным 1 атм.
2. С использованием метода Бенсона с учетом всех возможных поправок вычислите ΔH_f^0 для молекулы цис-1-метил-2-метилциклопентана при температуре 298 К и давлении, равным 1 атм.
3. Вычислите для н-бутана $\Delta H_f^0(800) - \Delta H_f^0(298)$, а также инкремент энтальпии $H^0(800) - H^0(298)$.

- Критерии и методика оценивания результатов контрольных работ

- 15 баллов выставляется студенту, если работа выполнена в полном объеме и изложена грамотным языком в определенной логической последовательности с точным использованием специализированной терминологии; показано уверенное владение нормативной базой;
- 12-14 баллов выставляется студенту, если работа выполнена в полном объеме, но имеет один из недостатков:
 - в работе допущены один-два недочета при освещении основного содержания ответа;
 - нет определенной логической последовательности, неточно используется специализированная терминология;
- 9-11 баллов выставляется студенту, если работа выполнена неполно, не показано общее понимание вопроса, имелись затруднения или допущены ошибки в определении понятий, использовании терминологии, при знании теоретического материала выявлена недостаточная сформированность основных умений и навыков.
- 6-8 баллов выставляется студенту, если студент выполнил контрольную работу менее чем на 50 %.
- 1-5 баллов выставляется студенту, если студент выполнил контрольную работу менее чем на 70 %.
- 0 баллов выставляется студенту, если студент вообще не приступал к выполнению контрольной работы.

Темы рефератов

по дисциплине Основы теоретической термодинамики

1. Изотерма Вант-Гоффа и ее использование для нахождения теплового эффекта химических реакций.
2. Связь между аррениусовскими параметрами и термодинамическими величинами.
3. Методы расчета термодинамических данных для свободных радикалов.
4. Гомодесмический метод определения термодинамических характеристик.
5. Теоретические методы определения термодинамических характеристик органических соединений.
6. Использование изодесмических реакций в квантово-химических расчетах.

7. Принцип аддитивности и его использование в расчете стандартных энтальпий образования химических соединений.
8. Расчет термодинамических функций газообразных соединений методами статистической термодинамики.
9. Квантово-химические методы и их использование для расчета свойств молекул и реакций.
10. Метод Питцера и Гвинна и его использование в статистической термодинамике.
11. Теоретические методы расчета энтальпии образования газообразных веществ.
12. Расчет термодинамических потенциалов органических соединений с использованием метода Бенсона.
13. Энергия активации сложных реакций и ее связь с изменением энтальпии.
14. Теория переходного состояния в термодинамике и химической кинетике.
15. Теоретические методы расчета энергии Гиббса для органических молекул и реакций.
16. Полуэмпирические квантово-химические методы в расчете термодинамических потенциалов органических соединений и реакций.
17. Abinitio методы в расчете термодинамических потенциалов органических соединений и реакций

- Критерии оценки (в баллах) рефератов:

Написание реферата следует начать с изложения плана темы, который как минимум включает 3 пункта. План должен быть логично изложен и должен включать в себя введение и заключение.

Реферат завершается списком использованной литературы.

Задачи студента при написании реферата заключаются в следующем:

1. логично и по существу изложить вопросы плана;
2. четко сформулировать мысли, последовательно и ясно изложить материал, правильно использовать термины и понятия;
3. показать умение применять теоретические знания на практике;
4. показать знание материала, рекомендованного по теме;
5. использовать для экономического обоснования необходимый статистический материал.

Реферат оценивается преподавателем кафедры по следующим критериям.

Объем реферата должен быть не менее 12-18 стр. машинописного текста (аналог – компьютерный текст Time New Roman, размер шрифта 14 через полтора интервала), включая титульный лист.

При оценке уровня выполнения реферата, в соответствии с поставленными целями для данного вида учебной деятельности, могут контролироваться следующие умения, навыки и компетенции:

- умение работать с объектами изучения, критическими источниками, справочной и энциклопедической литературой;
- умение собирать и систематизировать практический материал;
- умение самостоятельно осмысливать проблему на основе существующих методик;
- умение логично и грамотно излагать собственные умозаключения и выводы;
- умение соблюдать форму научного исследования;
- умение пользоваться глобальными информационными ресурсами;
- владение современными средствами телекоммуникаций;
- способность и готовность к использованию основных прикладных программных средств;
- способность создать содержательную презентацию выполненной работы.

Критерии оценки рефератов (в баллах)

- 0 баллов выставляется студенту, если студент не имеет представления об обсуждаемом вопросе;

- 1 балл выставляется студенту, если студент имеет фрагментарные представления об обсуждаемом вопросе (студент демонстрирует незнание теоретических основ предмета, не умеет делать аргументированные выводы и приводить примеры, почти не владеет монологической речью, не владеет терминологией, проявляет отсутствие логичности и последовательностью изложения, делает ошибки, которые не может исправить даже при коррекции преподавателем, отказывается отвечать на занятии);;

- 2 балла выставляется студенту, если студент имеет неполные представления об обсуждаемом вопросе (студент демонстрирует незнание теоретических основ предмета, не умеет делать аргументированные выводы и приводить примеры, показывает слабое владение монологической речью, не владеет терминологией, проявляет отсутствие логичности и последовательностью изложения, делает ошибки, которые не может исправить даже при коррекции преподавателем, отказывается отвечать на занятии);

- 3 балла выставляется студенту, если студент имеет не в достаточной мере сформированные и содержащие существенные пробелы представления об обсуждаемом вопросе (студент демонстрирует неглубокие теоретические знания, проявляет слабо сформированные навыки анализа явлений и процессов, недостаточное умение делать аргументированные выводы и приводить примеры, показывает не достаточно свободное владение монологической речью, терминологией, логичностью и последовательностью изложения, делает ошибки, которые может исправить только при коррекции преподавателем);

- 4 балла выставляется студенту, если студент имеет сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления об обсуждаемом вопросе (студент демонстрирует прочные теоретические знания, владеет терминологией, делает аргументированные выводы и обобщения, приводит примеры, показывает свободное владение монологической речью, но при этом делает несущественные ошибки, которые быстро исправляет самостоятельно или при незначительной коррекции преподавателем);

- 5 баллов выставляется студенту, если студент имеет сформированные систематические представления об обсуждаемом вопросе (студент демонстрирует системные теоретические знания, владеет терминологией, делает аргументированные выводы и обобщения, приводит примеры, показывает свободное владение монологической речью и способность быстро реагировать на уточняющие вопросы).

Комплект типовых задач (заданий) по дисциплине Основы теоретической термодинамики

Каждый студент в течение семестра должен решить шесть задач (по одной из каждого раздела).

Раздел 1

1. С использованием правила аддитивности свойств связей вычислите C_p^0 , S^0 , ΔH_f^0 для молекулы 2-метил-бутана при температуре 298 К и давлении, равным 1 атм.

2. С использованием правила аддитивности свойств связей вычислите C_p^0 , S^0 , ΔH_f^0 для молекулы пентана-2 при температуре 298 К и давлении, равным 1 атм.

3. С использованием правила аддитивности свойств связей вычислите C_p^0 , S^0 , ΔH_f^0 для молекулы втор-бутилового спирта 2-метил-бутана при температуре 298 К и давлении, равным 1 атм.

4. С использованием правила аддитивности свойств связей вычислите C_p^0 , S^0 , ΔH_f^0 для молекулы трет-бутилметилового эфира при температуре 298 К и давлении, равным 1 атм.

Раздел 2

1. С использованием метода Бенсона с учетом всех возможных поправок вычислите ΔH_f^0 для молекулы цис-1-метил-2-метилциклопентана при температуре 298 К и давлении, равным 1 атм.

2. С использованием метода Бенсона вычислите ΔH_f^0 для молекулы цис-этана при температуре 298 К и давлении, равным 1 атм.

3. С использованием метода Бенсона с учетом всех возможных поправок вычислите ΔH_f^0 для молекулы цис-пентана при температуре 298 К и давлении, равным 1 атм.

4. С использованием метода Бенсона с учетом всех возможных поправок вычислите ΔH_f^0 для молекулы 1,2-дихлорэтана в цис-конформации.

Раздел 3

1. Вычислите для н-бутана $\Delta H_f^0(800) - \Delta H_f^0(298)$, а также инкремент энтальпии $H^0(800) - H^0(298)$.
2. Вычислите для н-пентана $\Delta H_f^0(800) - \Delta H_f^0(298)$, а также инкремент энтальпии $H^0(800) - H^0(298)$.
3. Вычислите для н-бутана $\Delta H_f^0(880) - \Delta H_f^0(298)$, а также инкремент энтальпии $H^0(880) - H^0(298)$.
4. Вычислите для н-пентана $\Delta H_f^0(880) - \Delta H_f^0(298)$, а также инкремент энтальпии $H^0(880) - H^0(298)$.

Раздел 4

1. Рассчитать K_p при 750 К для реакции: $(CH_3)_3CCH_2Cl \Leftrightarrow (CH_3)_2C = CHCH_3 + HCl$.
2. Рассчитать K_p при 730 К для реакции: $(CH_3)_3CCH_2Br \Leftrightarrow (CH_3)_2C = CHCH_3 + HBr$.
3. Рассчитать K_p при 800 К для реакции: $(CH_3)_3CCH_2Cl \Leftrightarrow (CH_3)_2C = CHCH_3 + HCl$.
4. Рассчитать K_p при 850 К для реакции: $(CH_3)_3CCH_2Br \Leftrightarrow (CH_3)_2C = CHCH_3 + HBr$.

Раздел 5

1. Рассчитать вклад в C_p^0 , обусловленный заторможенным вращением CH_3CHCl_2 при 300 и 600 К.

2. Рассчитать вклад в C_p^0 , обусловленный заторможенным вращением CH_3CHBr_2 при 300 и 600 К.

3. Рассчитать вклад в C_p^0 , обусловленный заторможенным вращением CH_3CHCl_2 при 300 и 600 К. 4. Рассчитать вклад в C_p^0 , обусловленный заторможенным вращением CH_3CHBr_2 при 300 и 800 К.

Раздел 6

1. Вычислите абсолютную колебательную энтропию CH_3Br при 700 К.
2. Вычислите абсолютную колебательную энтропию CH_3Cl при 700 К.
3. Вычислите абсолютную колебательную энтропию CH_3F при 700 К.
4. Вычислите абсолютную колебательную энтропию CH_3I при 700 К.

Критерии оценки (в баллах):

5 баллов: Задание выполнено в полном объеме. Отчет выполнен аккуратно и в соответствии с предъявляемыми требованиями.

4 балла: Задание по работе выполнено в полном объеме. Качество оформления отчета работы не полностью соответствует требованиям. Есть мелкие ошибки в представлении результатов.

3 балла: Студент на 70% правильно выполнил задание по работе. Составил отчет в установленной форме, представил решения большинства заданий, предусмотренных в работе, но есть некоторые существенные ошибки в оформлении результатов.

2 балла: Студент неправильно выполнил от 50% до 69% заданий работы.

1 балл: Студент неправильно выполнил свыше 70% заданий работы и не может объяснить полученный результат.

0 баллов: Студент не выполнил все задания работы и не может объяснить полученный результат.

Студенты в конце каждого модуля проходят тестирование

Тестирование

Образец тестовых вопросов

1. Что выражают соотношения неопределённостей в квантовой механике.
 - а) Соотношения между погрешностями в определении координаты и импульса частицы;
 - б) Координаты и импульс микрочастицы;
 - в) Квантовые ограничения применимости классических понятий "координата и импульс" к микрообъектам отсутствуют;
 - г) Корпускулярные свойства вещества;
 2. Гипотеза Планка состоит в том, что
 - а) электромагнитные волны излучаются в виде отдельных порций (квантов), энергия которых зависит от частоты;
 - б) Электромагнитные волны поперечны;
 - в) Нельзя одновременно точно определить значение координаты и импульса;
 - г) электромагнитные волны излучаются зарядами движущимися с ускорением.
 3. Для расчета частицы SO_4^{2-} методом RHF наиболее подходящим будет базисный набор
 - а) 6-31++G;
 - б) 6-311G **;
 - в) 6-311++G;
 - г) STO-3G.
 4. Добавление диффузных функций в расчете молекулы H_2O методом RHF/6-31G
 - а) увеличивает полную энергию молекулы;
 - б) уменьшает полную энергию молекулы;
 - в) не изменяет полную энергию молекулы;
 - г) результат нельзя заранее предсказать.
 5. Оператор $x \frac{d}{dx}$ переводит функцию $\cos kx$ в функцию вида
 - 1) $-k \cos x$
 - 2) $-x \sin x$
 - 3) $-k \sin x$
 - 4) $\frac{dx}{x}$
- Критерии и методика оценивания:
Один тестовый вопрос (25 вопросов).
- 0,25 балл выставляется студенту, если ответ правильный;
- 0 баллов выставляется студенту, если ответ неправильный.

4.3 Рейтинг-план дисциплины (при необходимости)

Рейтинг-план дисциплины представлен в Приложении 2.

Критериями оценивания являются баллы, которые выставляются преподавателем за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения модулей, перечисленных в рейтинг-плане дисциплины (для зачета: текущий контроль – максимум 50 баллов; рубежный контроль – максимум 50 баллов, поощрительные баллы – максимум 10).

Шкала оценивания для зачета:

зачтено – от 60 до 110 рейтинговых баллов (включая 10 поощрительных баллов),
не зачтено – от 0 до 59 рейтинговых баллов).

5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

Основная литература

1. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия [Электронный ресурс] / В.И. Барановский. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2017. — 428 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/92941>. — Загл. с экрана.

2. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. пособ. для студ. вузов, обуч. по химич. спец. / В. И. Барановский .— М. : Академия, 2008 .— 383 с. — (Высшее профессиональное образование).

<http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+1160+default+2+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>.

3. Майер И., Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул [Электронный ресурс] : учебное пособие / Майер И. ; под ред. А. Л. Чугреева ; пер. с англ. М. Б. Дарховского, А. М. Токмачева. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 387 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/94102>. — Загл. с экрана.

4. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.Г. Цирельсон. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 522 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/94104>. — Загл. с экрана. Киселёв В. В. / Квантовая механика. Курс лекций / М.: МЦНМО, 2009. - 560 с.

5. Демидович, Б.П. Математические основы квантовой механики [Электронный ресурс] : учебное пособие / Б.П. Демидович. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2005. — 200 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/604>. — Загл. с экрана.

6. Крашенинин В.И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам [Электронный ресурс] / В.И. Крашенинин ; Е.Г. Газенаур ; Л.В. Кузьмина .— Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2012 .— 56 с. <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+1160+default+9+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>; <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678>>.

7. Квантовохимическое моделирование органических молекул и реакций. Выбор приближения. [Электронный ресурс]: учеб. пособие / И.В. Вакулин [и др.]; Башкирский государственный университет. — Уфа: РИЦ БашГУ, 2015. — Электрон. версия печ. публикации. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему «Электронная библиотека БашГУ».

<URL:https://elib.bashedu.ru/dl/read/Vakulin_Latypova_Talipov_Kvantovohimicheskoe_modelirovanie_up_2015.pdf>.

Дополнительная литература:

8. Хурсан С.Л. Методические указания для семинарских и практических занятий по курсу "Квантовая механика и квантовая химия"(раздел "Квантовая механика" : Учебное пособие / С.Л.Хурсан,Уч.-науч.комплекс "Интеграция" .— Уфа : Реактив, 2000 .— 43с.URL: [http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-](http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+3920+default+7+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus)

[bin/zgate.exe?present+3920+default+7+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus](http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+3920+default+7+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus)>.

9. [Ермаков, А. И.](#) Квантовая механика и квантовая химия : учеб. пособ. для студ. вузов, обуч. по спец. ВПО 020101.65 "Химия" / А. И. Ермаков .— М. : Юрайт, 2010 .— 555 с. — (Основы наук) .— ISBN 978-5-9916-0587-8. — ISBN 978-5-9692-0331-0.<URL: <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+3920+rs2+14+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>>.

10. Шпольский, Э.В. Атомная физика. Том 2. Основы квантовой механики и строение электронной оболочки атома [Электронный ресурс] : учебник / Э.В. Шпольский. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2010. — 448 с. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему издательства "Лань": <https://e.lanbook.com/book/443>. — Загл. с экрана.

11. Степанов Н.Ф. «Квантовая химия и квантовая механика» : учеб. пособие / Н. Ф. Степанов, В. И. Пупышев .— М. : МГУ, 1991 .— 384 с. : ил. — ISBN 5-211-01629-7.URL: <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+3920+default+1+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>>.

12. Задачи по квантовой теории [Электронный ресурс]: методические указания к проведению практических занятий по квантовой теории: Ч.2 / Башкирский государственный универ-

ситет; сост. Р.М. Вахитов. — Уфа: РИЦ БашГУ, 2017. — Электрон. версия печ. публикации. — Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему «Электронная библиотека БашГУ». — <URL:https://elib.bashedu.ru/dl/local/Vahitov_sost_Zadachi_po_kvantovoj_teorii_mu_Ch2_mu_2017.pdf>.

5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины

1. Электронная библиотечная система «ЭБ БашГУ» - <https://elib.bashedu.ru/>
2. Электронная библиотечная система «Университетская библиотека онлайн» - <https://biblioclub.ru/>
3. Электронная библиотечная система издательства «Лань» - <https://e.lanbook.com/>
4. Электронный каталог Библиотеки БашГУ - <http://www.bashlib.ru/catalogi/>
5. Универсальная Базы данных EastView (доступ к электронным научным журналам) - <https://dlib.eastview.com/browse>
6. Научная электронная библиотека - elibrary.ru (доступ к электронным научным журналам) - https://elibrary.ru/projects/subscription/rus_titles_open.asp
7. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные
8. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные
9. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г. Срок действия лицензии до 25.09.2019
10. Linux OpenSUSE 12.3 (x84_64) GNU General Public License.
11. Система централизованного тестирования БашГУ (Moodle). Универсальная общественная лицензия GNU.

6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Наименование специализированных аудиторий, кабинетов, лабораторий	Вид занятий	Наименование оборудования, программного обеспечения
<p>1. учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа: аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус)</p> <p>2. учебная аудитория для текущего контроля и промежуточной аттестации: аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус), аудитория № 001 (химфак корпус), аудитория № 002 (химфак корпус), аудитория № 006 (химфак корпус), аудито-</p>	<p>Аудитория № 405 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi XD3200U, экран с электроприводом 300*400см Spectra Classic</p>	<p>1. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные</p> <p>2. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные</p> <p>3. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г. Срок действия лицензии до 25.09.2019</p>
	<p>Аудитория № 311 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, проектор Mitsubishi XD 600U, экран с электроприводом Projecta 183*240см Matte white</p>	
	<p>Аудитория № 310 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p>	
	<p>Аудитория № 305 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p>	
	<p>Аудитория № 001 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p>	
	<p>Аудитория № 002 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p>	
	<p>Аудитория № 006 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p>	
<p>Аудитория № 007 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p>		

<p>рия № 007 (химфак корпус), аудитория № 008 (химфак корпус)</p> <p>3. помещения для самостоятельной работы: читальный зал № 1 (главный корпус), читальный зал №2 (физмат корпус-учебное), читальный зал № 5 (гуманитарный корпус), читальный зал № 6 (учебный корпус), читальный зал № 7 (гуманитарный корпус), лаборатория № 418 (химфак корпус)</p> <p>4. помещение для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования: аудитория № 405 (химфак корпус).</p>	<p>Аудитория № 008 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p>Читальный зал № 1 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, Wi-Fi доступ для мобильных устройств, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 76.</p> <p>Читальный зал №2 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок), подключенных к сети Интернет, – 8 шт., неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 50.</p> <p>Читальный зал № 5 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 27.</p> <p>Читальный зал № 6 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 6 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 30.</p> <p>Читальный зал № 7 Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 5 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 18.</p> <p>Аудитория № 004 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, коммутатор HP V1410-24G, персональный компьютер Lenovo ThinkCentre A70z Intel Pentium E 5800, 320 Gb, 19" - 15 шт, шкаф настенный TLK6U.</p> <p>Аудитория № 005 Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, компьютер DEPONeos 470 MDi5_3450/4GDDR/T500 G/DVD+R и монитор ViewSonic 21.5 - 13 шт, шкаф TLK TWP-065442-GGY, шкаф монтажный NT PRACTIC 2MP47-610B/SSi450/SKS1/SSi750,59560, 00 T.316-14, шкаф настенный TLK6U.</p> <p>Лаборатория № 416 Атомно-абсорбционный спектрофотометр модель AA-7000, фирмы "Шимадзу", Япония, баллон с гелием марки А – 2 шт, вентилятор ВЕНТС 100 ВКМц/*1/, газовый хромато-масс-спектрометр модель GCMS-QP 2010PIUS, компьютер в составе: системный блок, монитор, клавиатура, мышь, кондиционер QUATTROCUMA QV/QN-F12WA, ноутбук FujitsuLifebookKF530 IntelCorei3-330M/4Gb/500Gb/ DVD-RW/BT/15.6"/Win7НВ+office, персональный компьютер в комплекте HP AiO 20"CQ 100 eu (моноблок), электроплитка Irit IR-8200,1500Вт диаметр конфорки 185мм.</p>	
---	---	--

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ
дисциплины **Основы теоретической термохимии**
очная форма обучения

Вид работы	Объем дисциплины
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	3 / 108 часов
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	30,2
лекций	30
практических / семинарских	-
лабораторных	-
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем) (ФКР)	0,2
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	77,8
Учебных часов на подготовку к экзамену/зачету/дифференцированному зачету (Контроль)	-

Форма(ы) контроля:
зачет в 8 семестре

№ п/п	Тема и содержание	Форма изучения материалов: лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа и трудоемкость (в часах)				Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам (номера из списка)	Задания по самостоятельной работе студентов	Форма текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
		ЛК	ПР/СЕМ	ЛР	СРС			
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1.	Введение. Современные возможности квантовой химии. Свойства молекул и реакций, которые можно рассчитать квантовохимическими методами. Методы и программы.	2	-	-	4	[1-2, 6]	Проработать лекцию, рек. литературу, решение типовых задач по теме, подготовка к тестированию, написание реферата, подготовка к коллоквиуму и к зачету	тестирование, реферат, контрольная работа, решение типовых задач, коллоквиум
2.	Расчет термодинамических функций (энтропии, теплоемкости, изменения энтальпии и приведенной энергии Гиббса) газообразных соединений методом статистической термодинамики. Приближение "жесткий ротатор - гармонический осциллятор"	4	-	-	6	[1-12]	Проработать лекцию, рек. литературу, решение типовых задач по теме, подготовка к тестированию, написание реферата, подготовка к коллоквиуму и к зачету	тестирование, реферат, контрольная работа, решение типовых задач, коллоквиум
3.	Учет вклада движений большой амплитуды (внутреннего вращения, инверсии, псевдовращения) в термодинамические функции многоатомных газов. Метод Питцера и Гвинна. Выражение статистической суммы по состояниям свободного вращения. Учет вклада движений большой амплитуды в термодинамические функции непосредственным суммированием по уровням энергии соответствующих потенциальных функций. Учет взаимодействия движений большой амплитуды. Приближение невзаимодействующих волчков для молекул с небольшим числом торсионных степеней свободы.	6	-	-	10	[1-12]	Проработать лекцию, рек. литературу, решение типовых задач по теме, подготовка к тестированию, написание реферата, подготовка к коллоквиуму и к зачету	тестирование, реферат, контрольная работа, решение типовых задач, коллоквиум
4.	Приближенный метод вычисления термодинамических функций веществ с элементами статистического расче-	6	-	-	12	[1-12]	Проработать лекцию, рек. литературу, реше-	тестирование, реферат, контрольная работа,

	та. Расчет равновесных смесей изомеров или конформеров через их мольные доли и термодинамические функции отдельных конформеров с введением для энтропии и энергии Гиббса поправок на смешение (метод Питцера-Астона). Приближенный учет энтропийного фактора при расчете равновесного состава. Расчет константы равновесия реакций изомеризации.						ние типовых задач по теме, подготовка к тестированию, написание реферата, подготовка к коллоквиуму и к зачету	решение типовых задач, коллоквиум
5	Метод расчета энтальпии образования газообразного вещества, основанный на определении значения энергии атомизации из теоретического расчета. Основные соотношения. Энтальпия образования вещества из элементов в стандартных состояниях при 0 К и при 298 К. Величины, определяемые из теоретического расчета: энергии атомов, энергия молекулы, поправка на колебания при 0 К и термическая поправка. Расчет энергии атомов. Точность различных квантовохимических методов при расчете энтальпий образования.	4	-	-	15	[1-12]	Проработать лекцию, рек. литературу, решение типовых задач по теме, подготовка к тестированию, написание реферата, подготовка к коллоквиуму и к зачету	тестирование, реферат, контрольная работа, решение типовых задач, коллоквиум
6	Расчет энтальпий образования методом изодесмических реакций. Основные уравнения метода. Частичное погашение ошибок, связанных с неполнотой базисного набора и неполнотой поправки на корреляцию электронов. Возможность использования теории среднего уровня. Выбор изодесмических реакций: путь к успеху определяется подбором хорошо сбалансированных реакций и наличием надежных экспериментальных значений энтальпии образования для всех модельных соединений.	4	-	-	15	[1-12]	Проработать лекцию, рек. литературу, решение типовых задач по теме, подготовка к тестированию, написание реферата, подготовка к коллоквиуму и к зачету	тестирование, реферат, контрольная работа, решение типовых задач, коллоквиум
7	Расчет энергии разрыва связи из энтальпии образования молекулы и энтальпий образования радикалов, образующихся при разрыве данной связи. Особенности расчета энергий радикалов. Методы, специально разработанные для расчета энтальпий образования радикалов. Расчет энергий ионизации, сродства к электрону и протону. Расчет энтальпий образования газообразных соединений для проверки надежности экспериментальных значений энтальпий образования как в газовой, так и конденсированной фазе, а также энтальпий испарения и сублимации.	4	-	-	15,8	[1-12]	Проработать лекцию, рек. литературу, решение типовых задач по теме, подготовка к тестированию, написание реферата, подготовка к коллоквиуму и к зачету	тестирование, реферат, контрольная работа, решение типовых задач, коллоквиум
	Всего часов:	30			77,8			

Рейтинг – план дисциплины

Основы теоретической термодинамики

Направление подготовки 04.03.01 «Химия»

Курс 4, семестр 8

Виды учебной деятельности студентов	Балл за конкретное задание	Число заданий за семестр	Баллы	
			Минимальный	Максимальный
Модуль 1				
Текущий контроль				
1. Тест №1	7,50	1	0	7,50
2. Типовые задачи	5,00	4	0	20,00
Рубежный контроль				
Контрольная работа №1	15,00	1	0	15,00
Модуль 2				
Текущий контроль				
1. Типовые задачи	5,00	2	0	10,00
2. Реферат	5,00	1	0	5,00
3. Тест №2	7,50	1	0	7,50
Рубежный контроль				
Коллоквиум	15,00	1	0	15,00
Посещаемость				
1. Посещение лекционных занятий			0	-6,00
2. Посещение практических (семинарских, лабораторных) занятий			0	-10,00

			Итого	100
Поощрительные баллы				
Участие в олимпиадах	1,00		0	1,00
Участие в конференциях	2,00		0	2,00
Публикация тезисов	3,00		0	3,00
Публикация статей	4,00		0	4,00
			Итого	10
Итоговый контроль				
Зачет			0,00	100,00