

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Химический факультет

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОРГАНИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Кафедра физической и органической химии
химического факультета

Образовательная программа
04.04.01 Химия

Профиль подготовки: **«Органическая химия»**

Уровень высшего образования: **магистратура**

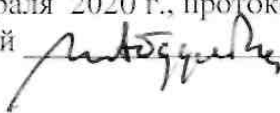
Форма обучения: **Очная**

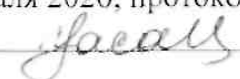
Статус дисциплины: дисциплина входит в часть формируемую участниками образовательных отношений модуля профильной направленности

Махачкала, 2020 г.

Рабочая программа дисциплины «Физико-химические свойства органических материалов» составлена в 2020 году в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 – Химия (уровень магистратуры) от 13.07.2017 №655.

Разработчик(и): кафедра физической и органической химии, Абдулагатов И. М., д.т.н., проф., Рамазанова П.А., к.х.н., доцент.

Рабочая программа дисциплины одобрена:
на заседании кафедры физической и органической химии
от «19» февраля 2020 г., протокол № 6
Зав. кафедрой  проф. Абдулагатов И.М.
(подпись)

на заседании Методической комиссии химического факультета
от « 21 » февраля 2020, протокол № 6.
Председатель  доц. Гасангаджиева У.Г.
(подпись)

Рабочая программа дисциплины согласована с учебно-методическим управлением « 23 » марта 2020 г. 
(подпись)

Аннотация рабочей программы дисциплины

Дисциплина “Физико-химические свойства органических материалов” входит в часть формируемую участниками образовательных отношений модуля профильной направленности Б.1.В.01.03 образовательной программы *магистратуры* 04.04.01 Химия.

Дисциплина реализуется на химическом факультете кафедрой физической и органической химии.

Содержание дисциплины охватывает круг вопросов, связанных с изучением физико-химических свойств органических веществ, который позволяет глубже понять экспериментальные и теоретические основы определения физико-химических свойств органических материалов, уметь рассчитать необходимые для практических и химико-технологических расчетов свойства органических веществ и материалов

Дисциплина нацелена на формирование следующих профессиональных компетенций выпускника: ПК-1, ПК-3, ПК-5, ПК-6.

Преподавание дисциплины предусматривает проведение следующих видов учебных занятий: *лекции, лабораторные занятия, самостоятельная работа.*

Рабочая программа дисциплины предусматривает проведение следующих видов контроля успеваемости в форме *отчетов по лабораторным работам, коллоквиумов, контрольных работ и промежуточный контроль в форме зачета.*

Объем дисциплины 3 зачетные единицы, в том числе в академических часах по видам учебных занятий:

Семе- стр	Учебные занятия в том числе						СРС, в том числе экзамен	Форма проме- жуточной атте- стации (зачет, дифференциро- ванный зачет, экзамен
	Контактная работа обучающихся с преподавателем							
	Все го	Лек- ции	Лабора- торные занятия	из них Практ. занятия	КСР	Кон- сульт		
3	108	18	36	-	-	-	54	зачет

1. Цели освоения дисциплины

Преподавание дисциплины “Физико-химические свойства органических материалов” ставит цели:

- освоить экспериментальные основы определения физико-химических свойств органических веществ;
- глубже понять теоретические методы расчета и предсказания физико-химических свойств органических веществ;
- освоить основу методов прогнозирования физико-химических свойств органических веществ и уметь их применять для практических расчетов;

- освоить основные стандартные программы (REFPROP TRC/NIST, ASPEN PLUS), используемые для расчетов физико-химических свойств органических веществ, необходимые для химико-технологических расчетов, конструирования технологических оборудования и оптимизации технологических процессов.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП магистратуры

Дисциплина “Физико-химические свойства органических материалов” входит в часть формируемую участниками образовательных отношений модуля профильной направленности Б.1.В.01.03 образовательной программы *магистратуры* 04.04.01 Химия.

Курс “Физико-химические свойства органических материалов” знакомит обучающихся с основами экспериментальных и теоретических методов определения физико-химических свойств органических веществ и методами оценки их достоверности.

Данная дисциплина изучается после изучения курсов “Аналитическая химия”, “Органическая химия”, “Неорганическая химия”, “Физико-химические методы анализа”.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (перечень планируемых результатов обучения).

Код и наименование профессиональной компетенции	Код и наименование индикатора достижения профессиональной компетенции выпускника	Результаты обучения	Дисциплины учебного плана
Тип задачи профессиональной деятельности – научно-исследовательский			
ПК-1. Способен определять стратегию проведения реакции и ее результат (состав продуктов и их стереохимию, возможность катализа, оптимизацию растворителя и т.п.) на основе теоретических знаний в области органической химии	ПК-1.1. Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий,	Знает: стратегию проведения реакций органической химии Умеет: составлять общий план проведения реакций включая отдельные стадии реакций Владеет: навыками проведения реакций в органической химии	Химия пятичленных гетероциклических соединений Биологически активные органические соединения Перспективные органические и гибридные наноструктуры. Физико-химические свойства органических материалов. Теоретические основы химических процессов переработки нефти и газа. Преддипломная практика. Учебная практика. Научно - исследовательская работа. Государственная итоговая аттестация
	ПК-1.2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические ме-	Знает: экспериментальные методы проведения реакций Умеет: проводить расчетно-теоретические исследования	

	тоды решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	Владеет: навыками оптимизации имеющихся материальных и временных ресурсов	
ПК-3 Способен использовать фундаментальные понятия органической химии и основные теоретические подходы к изучению механизмов реакций органических соединений при решении задач профессиональной деятельности	ПК-3.1. Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными	Знает: фундаментальные понятия органической химии Умеет: изучать механизмы реакций органических соединений в ходе НИР и НИОКР Владеет: методами систематизации информации и сопоставления с литературными данными	Техногенные системы и экологический риск. Физико-химические свойства органических материалов. Теоретические основы химических процессов переработки нефти и газа. Корреляционный анализ органических соединений на основе газожидкостной хроматографии. Преддипломная практика. Государственная итоговая аттестация
	ПК-3.2. Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов	Знает: теоретические основы протекания органических реакций Умеет: выбирать направления развития работ и перспективы практического применения Владеет: методикой поиска теоретических данных	
ПК-5 Способен интерпретировать результаты эксперимента и теоретических расчетов, применяя их при решении практических задач в области органической химии	ПК-5.1. Интерпретирует результаты органического синтеза с использованием результатов физико-химического анализа полученных веществ	Знает: методы интерпретации эксперимента для решения практических задач органической химии Умеет: интерпретировать результаты синтеза по физико-химическим данным анализа Владеет: методами интерпретации результатов для решения практических задач	Химия пятичленных гетероциклических соединений. Биологически активные органические соединения. Физико-химические свойства органических материалов. Преддипломная практика. Научно-исследовательская работа. Государственная итоговая аттестация
	ПК-5.2. Использует знание теоретических основ физико-химических методов анализа при выборе способов изучения строения и структуры органических веществ	Знает: теоретические основы физико-химических методов анализа Умеет: выбирать методы изучения строения и структуры органических веществ Владеет: методами физико-химического анализа	

3.1.4. Рекомендуемые профессиональные компетенции выпускников и индикаторы их достижения

Код и наименование профессиональной компетенции	Код и наименование индикатора достижения профессиональной компетенции выпускника	Результаты обучения	Дисциплины учебного плана
Тип задачи профессиональной деятельности – организационно-управленческий, технологический			
ПК-6. Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	ПК-6.1. Проводит поиск специализированной информации в патентно-информационных базах данных	Знает: патентное право Умеет: оформлять патенты в области органической химии Владеет: навыками поиска научной информации в базах данных патентов	Физико-химические свойства органических материалов. Теоретические основы химических процессов переработки нефти и газа. Преддипломная практика. Научно-исследовательская работа. Государственная итоговая аттестация
	ПК-6.2. Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)	Знает: методы обобщения патентной информации Умеет: анализировать результаты патентного поиска Владеет: методами поиска и анализа патентной информации	

4. Объем, структура и содержание дисциплины.

4.1. Объем дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 академических часов.

4.2. Структура дисциплины.

№ п/п	Разделы и темы дисциплины	Семестр	Неделя	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра)
				Лек	Пр	Л	Конт		
					акт	а	б	раб.	Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
Модуль 1. Теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ									
1	Теоретически обоснованные уравнения состояния органических веществ	3		2		4		6	Устный опрос, письменный опрос
2	Расчетно-теоретические методы определения физико-химических	3		2		4		6	Устный опрос, письменный опрос

	свойств органических веществ. Эмпирические уравнения состояния								
3	Методы прогнозирования физико-химических свойств органических веществ	3		2		4		6	Устный опрос, письменный опрос
	Итого по модулю 1:	36		6		12		18	коллоквиум
	Модуль 2. Экспериментальные методы определения физико-химических свойств органических веществ								
4	Методы измерения температуры, давления, плотности	3		2		4		3	Устный опрос, письменный опрос
5	Методы измерения давления насыщенных паров	3		2		4		3	Устный опрос, письменный опрос
6	Методы измерения калорических свойств (теплоемкости, энтальпии, теплоты сгорания) и поверхностных свойств (поверхностного натяжения)	3		2		4		3	Устный опрос, письменный опрос
7	Методы измерения транспортных свойств (вязкости, теплопроводности, коэффициента диффузии)			2		4		3	Устный опрос, письменный опрос
	Итого по модулю 2:	36		8		16		12	коллоквиум
	Модуль 3. Методы оценки погрешностей физико-химических свойств органических веществ								
8	Основные понятия и теория оценки погрешности измерений физическо-химических свойств	3		2		4		14	Устный опрос, письменный опрос
9	Стандартные программы для расчета справочных данных о свойствах органических веществ (REFPROP/TRC/NIST i Aspen Plus)	3		2		4		12	Устный опрос, письменный опрос
	Итого по модулю 2:	36		4		6		26	коллоквиум
	Всего:	108		18		36		54	зачет

4.3. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам).

4.3.1. Содержание лекционных занятий по дисциплине.

Модуль 1. Теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ

Тема 1. Теоретически обоснованные уравнения состояния органических веществ. Уравнение состояния, основанное на модели жестких сфер и жестких связей (SPHCT модель). Расчет основных термодинамических свойств органических веществ на основе SPHCT модели.

Тема 2. Расчетно-теоретические методы определения физико-химических свойств органических веществ. Эмпирические уравнения состояния. Трехпараметрические классические уравнения состояния типа Редлиха-Квонга, Сова, Пенга-Робинсона и др. многопараметрические уравнения состояния

Тема 3. Методы прогнозирования физико-химических свойств органических веществ. Принцип соответственных состояний для чистых веществ и бинарных смесей. Определение физико-химических свойств органических веществ на основе структурных данных. Межмолекулярные силы и свойства веществ

Модуль 2. Экспериментальные методы определения физико-химических свойств органических веществ

Тема 4. Методы измерения температуры, давления, плотности. Метод колеблющей трубки. Денсиметр. Метод пьезометра постоянного и переменного объемов. Метод Архимеда

Тема 5. Методы измерения давления насыщенных паров. Динамический метод. Статистический метод. Изопиестик метод.

Тема 6. Методы измерения калорических свойств (теплоемкости, энтальпии, теплоты сгорания) и поверхностных свойств (поверхностного натяжения). Адиабатический калориметр

Тема 7. Методы измерения транспортных свойств (вязкости, теплопроводности, коэффициента диффузии). Капиллярный метод, метод колеблющейся проволоки, метод падающего груза. Метод нагретой нити, метод плоского слоя, метод коаксиальных цилиндров

Модуль 3. Методы оценки погрешностей физико-химических свойств органических веществ

Тема 8. Основные понятия и теория оценки погрешности измерений физико-химических свойств. Стандартная погрешность измерений. Доверительный интервал. Статистическая обработка экспериментальных данных.

Тема 9. Стандартные программы для расчета справочных данных о свойствах органических веществ (REFPROP/TRC/NIST i Aspen Plus). Расчет термодинамических и термохимических свойств органических веществ на основе REFPROP программы (NIST/TRC). Построение двухмерных и трехмерных фазовых поверхностей в разных плоскостях

4.3.2. Содержание лабораторных занятий по дисциплине

№	Содержание лабораторной работы	Часы
Модуль 1. Теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ		
1	Лабораторная работа №1. Расчет термодинамических (термических и калорических) свойств веществ с помощью уравнения состояния Освоить расчетный метод основных термодинамических (калорических, объемных, акустических) свойств органических веществ на основе уравнения состояния	4

2	Лабораторная работа №2 . Расчет критических параметров чистых веществ с помощью уравнения состояния Освоить расчетный метод термодинамических свойств и критических параметров чистых органических веществ на основе уравнения состояния Редлиха-Квонга, Сова, Пенга-Робинсона.	4
3	Лабораторная работа №3. Предсказание термодинамических свойств чистых веществ на основе принципа соответственных состояний Освоить расчетный метод неизвестных термодинамических свойств органических веществ (прогнозирование) по минимум известным данным (по критическим параметрам)	4
Модуль 2. Экспериментальные методы определения физико-химических свойств органических веществ		
4	Лабораторная работа №4. Измерения термических свойств органических веществ Освоить на практике методы измерения температуры, давления, определения плотности, используя закон Архимеда или пикнометра	4
5	Лабораторная работа №5. Измерения термических свойств органических веществ Освоить экспериментальные методы измерения подавления насыщенных паров органических веществ	4
6	Лабораторная работа №6. Измерения калорических свойств органических веществ Освоить экспериментальные методы измерения теплоемкости и поверхностного натяжения жидких органических веществ	4
7	Лабораторная работа №7. Измерения транспортных свойств органических веществ Освоить метод капиллярного течения для измерения вязкости жидких органических веществ	4
Модуль 3. Методы оценки погрешностей физико-химических свойств органических веществ		
8	Лабораторная работа №8. Оценка погрешностей экспериментальных измерений термодинамических свойств веществ Освоить технику оценки точности экспериментальных методов измерений термодинамических и транспортных свойств веществ	4
9	Лабораторная работа №9. Построить фазовые диаграммы (двухмерные и трехмерные термодинамические поверхности) в разных плоскостях, используя стандартные программы REFPROP (TRC/NIST) Освоить основу использования стандартной программы REFPROP для расчета термодинамических и транспортных свойств стандартных веществ и построение фазовых диаграмм	4

5. Образовательные технологии

В курсе по направлению подготовки магистров широко используются в учебном процессе компьютерные программы, различные методики в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития профессиональных навыков обучающихся. В соответствии с требованиями ФГОС предусматривается использование при проведении занятий следующих активных методов обучения:

- самостоятельное изучение теоретического материала с последующим разбором на семинарском занятии;
- подготовка к лабораторным работам;
- оформление результатов лабораторной работы;
- подготовка к промежуточному контролю;
- подготовка к зачету.

6. Учебно - методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Виды и порядок выполнения самостоятельной работы

1. Изучение рекомендованной литературы.
2. Подготовка к отчетам по лабораторным работам.
3. Подготовка к коллоквиуму.
4. Поиск в Интернете дополнительного материала.
5. Подготовка к зачету.

№	Вид самостоятельной работы	Вид контроля	Учебно-методич. обеспечение
1.	Изучение рекомендованной литературы.	Устный опрос по разделам дисциплины.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
2.	Подготовка к отчетам по лабораторным работам	Проверка выполнения расчетов, оформления работы в лабораторном журнале и проработки вопросов к текущей теме по рекомендованной литературе.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
3.	Подготовка к коллоквиуму	Промежуточная аттестация в форме контрольной работы.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
4.	Поиск в Интернете дополнительного материала.	Прием реферата и выступление с докладом.	См. разделы 6.2, 7.3, 8, 9 данного документа
5.	Подготовка к зачету.	Устный опрос, либо компьютерное тестирование.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.

1. Текущий контроль: подготовка к отчетам по лабораторным работам.
2. Текущий контроль: решение задач.
3. Промежуточная аттестация в форме контрольной работы.

Текущий контроль успеваемости осуществляется непрерывно, на протяжении всего курса. Прежде всего, это устный опрос по ходу лабораторных занятий, выполняемый для оперативной активизации внимания студентов и оценки их уровня восприятия. Результаты устного опроса учитываются при выборе индивидуальных задач для решения. Каждую неделю осуществляется проверка выполнения расчетов, оформления работы в лабораторном журнале.

Промежуточный контроль проводится в форме контрольной работы, в которой содержатся теоретические вопросы и задачи.

Итоговый контроль проводится либо в виде устного экзамена, либо в форме тестирования.

Оценка “отлично” ставится за уверенное владение материалом курса.

Оценка “хорошо” ставится при полном выполнении требований к прохождению курса и умении ориентироваться в изученном материале.

Оценка “удовлетворительно” ставится при достаточном выполнении требований к прохождению курса и владении конкретными знаниями по программе курса.

Оценка “неудовлетворительно” ставится, если требования к прохождению курса не выполнены и студент не может показать владение материалом.

7. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

7.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы.

Перечень компетенций с указанием этапов их формирования приведен в описании образовательной программы.

Код и наименование компетенции из ФГОС ВО	Код и наименование индикатора достижения универсальной компетенции выпускника	Планируемые результаты обучения	Процедура освоения
ПК-1	Способен определять стратегию проведения реакции и ее результат (состав продуктов и их стереохимию, возможность катализа, оптимизацию растворителя и т.п.) на основе теоретических знаний в области органической химии ПК-1.1. Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий. ПК-1.2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	Знает: стратегию проведения реакций органической химии Умеет: составлять общий план проведения реакций включая отдельные стадии реакций Владеет: навыками проведения реакций в органической химии Знает: экспериментальные методы проведения реакций Умеет: проводить расчетно-теоретические исследования Владеет: навыками оптимизации имеющихся материальных и временных ресурсов Знает: современные физико-химические методы анализа Умеет: пользоваться методами анализа и подготовки полученного материала в виде информационно-рекламного материала Владеет: методами интерпретации полученных результатов анализа Знает: возможности использования полученной информации для конкурсов Умеет: составлять заявки для финансирования научных исследований Владеет: методикой сбора и анализа информации Знает: вспомогательную документацию о конкурсах, грантах и т. д.	Устный опрос, письменный опрос, тестирование Письменный опрос, коллоквиум Круглый стол, деловая игра

		Умеет: готовить вспомогательную документацию Владеет: навыками составления и продвижения конкурсной документации	
ПК-3	Способен использовать фундаментальные понятия органической химии и основные теоретические подходы к изучению механизмов реакций органических соединений при решении задач профессиональной деятельности ПК-3.1. Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными ПК-3.2. Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов	Знает: современные экспериментальные методы определения физико-химических свойств органических материалов, знать теоретические основы этих методов Умеет: при необходимости проводить эксперимент по определению физико-химических свойств органических материалов, уметь оценить точность измерений физико-химических свойств Владеет: основами техники основных физических параметров таких как температура, давление, плотность, поверхностное натяжение, теплоемкость, вязкость, теплопроводность, показатель преломления	Устный опрос, письменный опрос, тестирование Письменный опрос, коллоквиум Круглый стол, деловая игра
ПК-5	Способен интерпретировать результаты эксперимента и теоретических расчетов, применяя их при решении практических задач в области орг ПК-5.1. Интерпретирует результаты органического синтеза с использованием результатов физико-химического анализа полученных веществ органической химии ПК-5.2. Использует знание теоретических основ физико-химических методов анализа при выборе	Знает: методы интерпретации эксперимента для решения практических задач органической химии Умеет: интерпретировать результаты синтеза по физико-химическим данным анализа Владеет: методами интерпретации результатов для решения практических задач Знает: теоретические основы физико-химических методов анализа Умеет: выбирать методы изучения строения и структуры органических веществ Владеет: методами физико-химического анализа	Устный опрос, письменный опрос, тестирование Письменный опрос, коллоквиум Круглый стол, деловая игра

	способов изучения строения и структуры органических веществ		
ПК-6	ПК-6. Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук ПК-6.1. Проводит поиск специализированной информации в патентно-информационных базах данных ПК-6.2. Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)	Знает: патентное право Умеет: оформлять патенты в области органической химии Владеет: навыками поиска научной информации в базах данных патентов Знает: методы обобщения патентной информации Умеет: анализировать результаты патентного поиска Владеет: методами поиска и анализа патентной информации	Устный опрос, тестирование, коллоквиум

7.2. Типовые контрольные задания

Вопросы по текущему контролю

Модуль 1. Теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ

1. Какова связь между потенциальной функцией межмолекулярных взаимодействий и уравнением состояния вещества?
2. Связь между потенциальной функцией межмолекулярных взаимодействий и вириальными коэффициентами?
3. Получить выражения для второго вириального коэффициента из уравнений Ван-дер-Ваальса.
4. Получить выражения для второго вириального коэффициента, используя простейшие потенциальные функции (например, Леннарда-Джонса потенциал или потенциал прямоугольной ямы).
5. Получить связь между термодинамическими функциями и вириальными коэффициентами.
6. Вывести формулу для изохорной теплоемкости Ван-дер-Ваальсовского газа.
7. Получить выражение для давления насыщенных паров из уравнения Ван-дер-Ваальса.
8. Получить выражение для уравнения плотности насыщенной жидкости и пара из уравнения Ван-дер-Ваальса.
9. Как определить параметры модельных потенциалов межмолекулярных взаимодействий из экспериментальных данных о термодинамических свойствах веществ?
10. Как можно предсказать свойства веществ на основе принципа соответственных состояний?

Модуль 2. Экспериментальные методы определения физико-химических свойств органических веществ

1. Какие существуют методы измерений давления?

2. Каковы физические основы метода измерения плотности жидкостей на основе закона Архимеда (пикнометрический метод)?
3. В чем заключается физическая суть метода измерения вязкости методом капиллярного течения?
4. Какие поправки надо ввести в рабочее уравнение для измерения вязкости методом капиллярного течения?
5. Физические основы метода измерения теплоемкости жидкостей методом адиабатического калориметра
6. Написать рабочее уравнение для определения поверхностного натяжения методом капиллярного поднятия
7. Физические основы изопиестик метода измерения давления насыщенных паров. Погрешности измерения метода
8. Привести уравнения для расчета теплопроводности жидкостей методом нагретой нити и объяснить принцип измерения этим методом. Какова точность метода и каковы преимущества по сравнению с другими методами?
9. В чем заключается физическая суть методов (динамического и статистического) измерения давления насыщенных паров?
10. Конструкция калориметрической бомбы и ее основные характеристики для определения теплоты сгорания. Методы определения энтальпии химических реакций.
11. Метод колеблющей проволоки для измерения вязкости жидкостей и его точность. Как зависит точность метода от геометрических и других характеристик измерительной ячейки?

Модуль 3. Методы оценки погрешностей физико-химических свойств органических веществ

1. Что вносит основной вклад в погрешность метода вакуумного адиабатического калориметра при измерении теплоемкости жидкостей?
2. Как определить погрешности экспериментальных методов определения термодинамических свойств веществ?
3. Как определить погрешности экспериментальных методов определения термодинамических свойств веществ?
4. Что такое стандартное отклонение и как оно определяется?
5. Как определяется среднее абсолютное отклонение?
6. Что такое ошибка отнесения и как она определяется?
7. Определить ошибки измерения плотности $\rho = m/V$, если ошибка измерения объема и массу составляет $\Delta V = 0.03 \text{ см}^3$ и $\Delta m = 0.001 \text{ г}$, соответственно?
8. Рассчитать ошибки определения молекулярного веса M метана из уравнения состояния идеального газа $P = (g/M)RT/V$, если при $t = 25 \pm 1 \text{ }^\circ\text{C}$, $V = 210 \pm 2 \text{ мл}$, $g = 137 \pm 2 \text{ мг}$, $P = 735 \pm 1 \text{ мм ртутного столба}$?
9. Рассчитать ошибки определения молекулярного веса M метана из уравнения состояния идеального газа?
10. Рассчитать теплоемкость калориметрической бомбы и ее погрешность, обусловленное ошибками измеряемых величин, используя соотношение $C_b = (6315G + 1600Y)/t - 0.999W$, где количество бензойной кислоты $G = 0.5478 \pm 0.0003 \text{ г}$, $Y = 0.020 \pm 0.001 \text{ г}$ масса проволоки, наблюдаемое увеличение температуры $t = 1.57 \pm 0.01 \text{ }^\circ\text{C}$, и количество воды в калориметр $W = 1875 \pm 2 \text{ г}$.
11. Кажущийся молярный объем для растворяемого вещества в бинарной смеси при заданной температуре и давлении определяется как

$$\phi_V = \frac{1}{m} \left[\frac{1000 + mM_2}{\rho} - \frac{1000}{\rho_1} \right].$$

Для водного раствора КОН (молекулярный вес $M_2=56.108$), определить погрешность расчета ϕ_V , если молялит $m=0.15 \pm 0.01$, $\rho = 1010 \pm 0.05 \text{ кг/м}^3$ и $\rho_1 = 999 \pm 0.01 \text{ кг/м}^3$.

Контрольные вопросы к зачету

1. Какова связь между потенциальной функцией межмолекулярных взаимодействий и уравнением состояния вещества?
2. Связь между потенциальной функцией межмолекулярных взаимодействий и вириальными коэффициентами?
3. Получить выражения для второго вириального коэффициента из уравнений Ван-дер-Ваальса.
4. Получить выражения для второго вириального коэффициента используя простейшие потенциальные функции (например, Леннарда-Джонса потенциал или потенциал прямоугольной ямы).
5. Получить связь между термодинамическими функциями и вириальными коэффициентами.
6. Вывести формулу для изохорной теплоемкости Ван-дер-Ваальсовского газа.
7. Получить выражение для давления насыщенных паров из уравнения Ван-дер-Ваальса.
8. Получить выражение для уравнения плотности насыщенной жидкости и пара из уравнения Ван-дер-Ваальса.
9. Как определить параметры модельных потенциалов межмолекулярных взаимодействий из экспериментальных данных о термодинамических свойствах веществ?
10. Как можно предсказать свойства веществ на основе принципа соответственных состояний?
11. Какие существуют методы измерений давления?
12. Каковы физические основы метода измерения плотности жидкостей на основе закона Архимеда (пикнометрический метод)?
13. В чем заключается физическая суть метода измерения вязкости методом капиллярного течения?
14. Какие поправки надо ввести в рабочее уравнение для измерения вязкости методом капиллярного течения?
15. Физические основы метода измерения теплоемкости жидкостей методом адиабатического калориметра
16. Написать рабочее уравнение для определения поверхностного натяжения методом капиллярного поднятия
17. Физические основы изопиестик метода измерения давления насыщенных паров. Погрешности измерения метода
18. Привести уравнения для расчета теплопроводности жидкостей методом нагретой нити и объяснить принцип измерения этим методом. Какова точность метода и каковы преимущества по сравнению с другими методами?
19. В чем заключается физическая суть методов (динамического и статистического) измерения давления насыщенных паров?
20. Конструкция калориметрической бомбы и ее основные характеристики для определения теплоты сгорания. Методы определения энтальпии химических реакций.
21. Метод колеблющей проволоки для измерения вязкости жидкостей и его точность. Как зависит точность метода от геометрических и других характеристик измерительной ячейки?
22. Что вносит основной вклад в погрешность метода вакуумного адиабатического калориметра при измерении теплоемкости жидкостей?

23. Как определить погрешности экспериментальных методов определения термодинамических свойств веществ?
24. Как определить погрешности экспериментальных методов определения термодинамических свойств веществ?
25. Что такое стандартное отклонение и как оно определяется?
26. Как определяется среднее абсолютное отклонение?
27. Что такое ошибка отнесения и как она определяется?
28. Определить ошибки измерения плотности $\rho = m/V$, если ошибка измерения объема и массу составляет $\Delta V = 0.03 \text{ см}^3$ и $\Delta m = 0.001 \text{ г}$, соответственно?
29. Рассчитать ошибки определения молекулярного веса M метана из уравнения состояния идеального газа $P = (g/M)RT/V$, если при $t = 25 \pm 1 \text{ }^\circ\text{C}$, $V = 210 \pm 2 \text{ мл}$, $g = 137 \pm 2 \text{ мг}$, $P = 735 \pm 1 \text{ мм ртутного столба}$?
30. Рассчитать ошибки определения молекулярного веса M метана из уравнения состояния идеального газа?
31. Рассчитать теплосмкость калориметрической бомбы и ее погрешность, обусловленное ошибками измеряемых величин, используя соотношение $C_b = (6315G + 1600Y)/t - 0.999W$, где количество бензойной кислоты $G = 0.5478 \pm 0.0003 \text{ г}$, $Y = 0.020 \pm 0.001 \text{ г}$ масса проволоки, наблюдаемое увеличение температуры $t = 1.57 \pm 0.01 \text{ }^\circ\text{C}$, и количество воды в калориметр $W = 1875 \pm 2 \text{ г}$.
32. Кажущийся молярный объем для растворяемого вещества в бинарной смеси при заданной температуре и давлении определяется как

$$\phi_V = \frac{1}{m} \left[\frac{1000 + mM_2}{\rho} - \frac{1000}{\rho_1} \right].$$

Для водного раствора КОН (молекулярный вес $M_2 = 56.108$), определить погрешность расчета ϕ_V , если молялит $m = 0.15 \pm 0.01$, $\rho = 1010 \pm 0.05 \text{ кг/м}^3$ и $\rho_1 = 999 \pm 0.01 \text{ кг/м}^3$.

Примерные темы рефератов

1. Межмолекулярные взаимодействия и уравнение состояния веществ
2. Простейшие потенциальные функции (прямоугольные ямы, модель жестких сфер) и уравнения состояния
3. Вириальные коэффициенты и их связь с потенциальной функцией межмолекулярных взаимодействий. Расчет термодинамических свойств на основе вириальных коэффициентов
4. Эмпирические уравнения состояния и расчет термодинамических свойств
5. Методы прогнозирования термодинамических свойств n-алканов на линии насыщения на основе принципа соответственных состояний
6. Разработка уравнения состояния органических веществ на основе экспериментальных данных
7. Экспериментальное определение теплосмкости органических материалов методом сканирующего калориметра
8. Измерение вязкости органических жидкостей методом капиллярного течения
9. Измерение поверхностного натяжения органических жидкостей методом лежащей капли и капиллярным подъемом
10. Использование REFPROP для расчета стандартных термодинамических характеристик органических материалов
12. Определение параметров модельных потенциалов межмолекулярных взаимодействий из экспериментальных данных о термодинамических свойствах веществ

7.3. Методические материалы, определяющие процедуру оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.

Общий результат выводится как интегральная оценка, складывающаяся из текущего контроля - 70% и промежуточного контроля - 30%.

Текущий контроль по дисциплине включает:

- посещение занятий - 5 баллов,
- участие на практических занятиях - 0 баллов,
- выполнение лабораторных заданий – 30 баллов,
- выполнение домашних (аудиторных) контрольных работ - 35 баллов.

Промежуточный контроль по дисциплине включает:

- устный опрос - 30 баллов,
- письменная контрольная работа - 30 баллов,
- тестирование - 30 баллов.

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

а) основная литература

1. Базаров И.П. Термодинамика: [учеб. для ун-тов по спец. "Физика"] [Текст] / Базаров, Иван Павлович. - 4-е изд., перераб. и доп. - М.: Высшая школа, 1991. - 375,[1] с. : ил. ; 21 см. - Предм. указ.: с. 374-376. - ISBN 5-06-000626-3: 1-30.
2. Ларичев, Т.А. Химическая термодинамика: электронное учебное пособие / Т.А. Ларичев, В.С. Ларичева. - Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2015. - 240 с. : схем., табл., ил. - ISBN 978-5-8353-1755-4 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=481564>
3. Карапетьянц М.Х. Химическая термодинамика: учебное пособие для хим. специальностей вузов [Текст]/Карапетьянц, Михаил Христофорович; М.Х. Карапетьянц. - 3-е изд., перераб. и доп. - М.: Химия, 1975. - 583 с. : 1 л.; + граф. - 1-61.

б) дополнительная литература

1. Физико-химия наночастиц, наноматериалов и наноструктур: учебное пособие / А.А. Барыбин, В.А. Бахтина, В.И. Томилин, Н.П. Томилина. - Красноярск: Сибирский федеральный университет, 2011. - 236 с. - ISBN 978-5-7638-2396-7; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=229593>
2. Нажипкызы М. Физико-химические основы нанотехнологий и наноматериалов [Электронный ресурс]: учебное пособие/ Нажипкызы М., Бейсенов Р.Е., Мансуров З.А.— Электрон. текстовые данные.— Саратов: Ай Пи Эр Медиа, 2018.— 196 с.— Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/73346.html>.

9. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

- 1) eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]: электронная библиотека / Науч. электрон.б-ка. – Москва, 1999. – Режим доступа: <http://elibrary.ru/defaultx.asp> – Яз. рус., англ.
- 2) Электронный каталог НБ ДГУ [Электронный ресурс]: база данных содержит сведения о всех видах лит, поступающих в фонд НБ ДГУ/Дагестанский гос. ун-т. – Махачкала, 2010 – Режим доступа: <http://elib.dgu.ru>, свободный
- 3) Moodle [Электронный ресурс]: система виртуального обучения: [база данных] / Даг.гос. ун-т. – Махачкала, г. – Доступ из сети ДГУ или, после регистрации из сети ун-та, из любой точки, имеющей доступ в интернет. – URL: <http://moodle.dgu.ru/>
- 4) ЭБС ibooks.ru [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: <https://ibooks.ru/>

5. ЭБС book.ru[Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: www.book.ru/
6. ЭБС iprbook.ru [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/31168.html>

10. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Методические указания студентам должны раскрывать рекомендуемый режим и характер учебной работы по изучению теоретического курса (или его раздела/части), практических и/или семинарских занятий, лабораторных работ (практикумов), и практическому применению изученного материала, по выполнению заданий для самостоятельной работы, по использованию информационных технологий и т.д. Методические указания должны мотивировать студента к самостоятельной работе и не подменять учебную литературу.

Указывается перечень учебно-методических изданий, рекомендуемых студентам для подготовки к занятиям и выполнения самостоятельной работы, а также методические материалы на бумажных и/или электронных носителях, выпущенные кафедрой своими силами и предоставляемые студентам во время занятий:

- рабочие тетради студентов;
- наглядные пособия;
- гlossарий (словарь терминов по тематике дисциплины);
- тезисы лекций,
- раздаточный материал и др.

Самостоятельная работа студентов, предусмотренная учебным планом в объеме не менее 50-70% общего количества часов, должна соответствовать более глубокому усвоению изучаемого курса, формировать навыки исследовательской работы и ориентировать студентов на умение применять теоретические знания на практике.

Задания для самостоятельной работы составляются по разделам и темам, по которым не предусмотрены аудиторские занятия, либо требуется дополнительно проработать и проанализировать рассматриваемый преподавателем материал в объеме запланированных часов.

Задания по самостоятельной работе могут быть оформлены в виде таблицы с указанием конкретного вида самостоятельной работы:

- конспектирование первоисточников и другой учебной литературы;
- проработка учебного материала (по конспектам лекций учебной и научной литературе) и подготовка докладов на семинарах и практических занятиях, к участию в тематических дискуссиях и деловых играх;
- работа с нормативными документами и законодательной базой;
- поиск и обзор научных публикаций и электронных источников информации, подготовка заключения по обзору;
- выполнение контрольных работ, творческих (проектных) заданий, курсовых работ (проектов);
- решение задач, упражнений;
- написание рефератов (эссе);
- работа с тестами и вопросами для самопроверки;
- выполнение переводов на иностранные языки/с иностранных языков;
- моделирование и/или анализ конкретных проблемных ситуаций;
- обработка статистических данных, нормативных материалов;
- анализ статистических и фактических материалов, составление выводов на основе проведенного анализа и т.д.

Самостоятельная работа должна носить систематический характер, быть интересной и привлекательной для студента.

Результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем и учитываются при аттестации студента (зачет, экзамен). При этом проводятся: тестирование, экспресс-опрос на семинарских и практических занятиях, заслушивание докладов, проверка письменных работ и т.д.

Разделы и темы для самостоятельного изучения	Виды и содержание самостоятельной работы
Модуль 1. Теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ Тема 1. Теоретически обоснованные уравнения состояния органических веществ. Уравнение состояния, основанное на модели жестких сфер и жестких связей (SPHCT модель). Расчет основных термодинамических свойств органических веществ на основе SPHCT модели.	Расчитать основные термодинамические функции (энтропию, энтальпию, фазовую диаграмму, теплоемкость) органических веществ на основе SPHCT модели уравнения состояния. Вывести основные формулы для расчета термодинамических свойств веществ из уравнения состояния.
Модуль 1. Теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ Тема 2. Расчетно-теоретические методы определения физико-химических свойств органических веществ. Эмпирические уравнения состояния. Трехпараметрические классические уравнения состояния типа Редлиха-Квонга, Сова, Пенга-Робинсона и др. многопараметрические уравнения состояния	Получить выражения для расчета основных термодинамических характеристик органических веществ из уравнений состояния Редлиха-Квонга, Сова, Пенга-Робинсона. Написать программу для расчета этих свойств на РС. Сравнить расчеты с экспериментом для конкретных органических соединений.
Модуль 1. Теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ Тема 3. Методы прогнозирования физико-химических свойств органических веществ. Принцип соответственных состояний для чистых веществ и бинарных смесей. Определения физико-химических свойств органических веществ на основе структурных данных. Межмолекулярные силы и свойства веществ	Определить физико-химических свойства органических веществ на основе структурных данных и межмолекулярные силы используя простейшие потенциальные функции как потенциал Леннарда-Джонса. Расчитать на основе принцип соответственных состояний термодинамические функции чистых органических соединений и сравнить предсказанные свойства с экспериментом и расчетами из уравнений состояния.
Модуль 2. Экспериментальные методы определения физико-химических свойств органических веществ Тема 4. Методы измерения температуры, давления, плотности. Метод колеблющей трубки. Денсиметр. Метод пьезометра постоянного и переменного объемов. Метод Архимеда	Вывести рабочие уравнения для методов измерения плотности (пьезометра постоянного и переменного объемов, метод колеблющей трубки и метод Архимеда). Расчитать для этих методов погрешности измерений.
Модуль 2. Экспериментальные методы определения физико-химических свойств органических веществ Тема 5. Методы измерения давления насыщенных паров. Динамический метод. Стати-	Вывести рабочее уравнение для метода измерения давления насыщенных паров (динамический метод, статистический метод, изопиестик метод). Оценить погрешностей измерений каждым из этих мето-

стический метод. Изопиестик метод.	дов и сравнить их.
Модуль 2. Экспериментальные методы определения физико-химических свойств органических веществ Тема 6. Методы измерения калорических свойств (теплоемкости, энтальпии, теплоты сгорания) и поверхностных свойств (поверхностного натяжения). Адиабатический калориметр	Вывести рабочее уравнение для метода измерения теплоемкости на основе адиабатического калориметра. Анализировать погрешности измерений теплоемкости этим методом. Определить постоянную калориметра на основе структурных характеристик калориметрической ячейки.
Модуль 2. Экспериментальные методы определения физико-химических свойств органических веществ Тема 7. Методы измерения транспортных свойств (вязкости, теплопроводности, коэффициента диффузии). Капиллярный метод, метод колеблющейся проволоки, метод падающего груза. Метод нагретой нити, метод плоского слоя, метод коаксиальных цилиндров	Вывести рабочее уравнение для методов измерений вязкости и теплопроводности (капиллярный метод, метод колеблющейся проволоки, метод падающего груза, метод нагретой нити, метод плоского слоя, метод коаксиальных цилиндров). Анализировать погрешности измерений вязкости и теплопроводности для каждого метода.
Модуль 3. Методы оценки погрешностей физико-химических свойств органических веществ Тема 8. Основные понятия и теория оценки погрешности измерений физическо-химических свойств. Стандартная погрешность измерений. Доверительный интервал. Статистическая обработка экспериментальных данных	Используя теорию ошибок, рассчитать стандартную погрешность измерений для различных методов определения термодинамических характеристик органических веществ. Используя метод наименьших квадратов, определить параметры различных физических моделей на основе экспериментальных данных.
Модуль 3. Методы оценки погрешностей физико-химических свойств органических веществ Тема 9. Стандартные программы для расчета справочных данных о свойствах органических веществ (REFPROP/TRC/NIST i Aspen Plus). Расчет термодинамических и термохимических свойств органических веществ на основе REFPROP программы (NIST/TRC). Построение двумерных и трехмерных фазовых поверхностей в разных плоскостях.	Построить двумерные и трехмерные фазовые диаграммы органических соединений на базе стандартных программ REFPROP/TRC/NIST. Рассчитать и построить графики зависимостей различных термодинамических величин от параметров состояния в различных проекциях (по изохорам, по изотермам, по изобарам, по линии насыщения и т.д.)

11. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем.

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине “Физико-химические свойства органических веществ” используются следующие информационные технологии:

1. Программа для ЭВМ Microsoft Imagine Premium, 3 years, Renewal. Производитель: Microsoft Corporation Товарный знак: Майкрософт Корпорейшн (Microsoft®) Страна происхождения: Ирландия. Контракт №188-ОА, «21» ноября 2018 г.

2. Неисключительное право на использование Программного обеспечения SolidWorks Education Edition 200 CAMPUS (до 200 одновременных сетевых доступов) по сублицензионному договору № 052-кз от 17.07.2017 г

3. Acrobat Professional 9 Academic Edition и Acrobat Professional 9 DVD Set Russian Windows ГК №26-ОА от «07» декабря 2009 г
4. ChemOffice Professional AcademicEdition (приложение № 2 к Государственному контракту №26-ОА от «07» декабря 2009 г.)
5. Statistica for Windows v.6 Russian Education , по ГК №26-ОА от «07» декабря 2009 г

12. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

В соответствии с требованиями ФГОС кафедра имеет специально оборудованную учебную аудиторию для проведения лекционных занятий, которая укомплектована техническими средствами обучения (экран настенный с электроприводом и дистанционным управлением, мультимедиа проектор с ноутбуком).

Основные экспериментальные измерения будут проводиться на базе Лабораторий Института Физики ДНЦ РАН. В лаборатории Фазовых переходов и критических явлений имеются современные оборудования и установки для измерений вязкости (ВПЖ-1,2,3, метод падающего груза), пьезометр постоянного объема для измерений плотности, установки для измерений коэффициента поверхностного натяжения методами лежащей капли и капиллярного поднятия. Теоретическая часть занятий будет проходить на кафедре физической и органической химии и в компьютерном классе.