

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ  
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: **вариативная**

Махачкала, 2016 г.

Рабочая программа дисциплины **“Физико-химические свойства органических материалов”** составлена в 2016 году в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 Химия (уровень магистратура) от «23» сентября 2015 г. № 1042.

Разработчик: кафедра физической и органической химии, Абдулагатов И.М., д.т.н., профессор

Рабочая программа дисциплины одобрена:  
на заседании кафедры физической и органической химии  
от «4» 09 2016 г., протокол № 1

Зав. кафедрой И. Абдулагатов проф. Абдулагатов И.М.  
(подпись)

на заседании Методической комиссии Химический факультета от  
«23» 09 2016 г., протокол № 1.

Председатель М.А. Бабуев Бабуев М.А.  
(подпись)

Рабочая программа дисциплины согласована с учебно-методическим  
управлением «23» 09 2016 г. А.А. Ахмедов  
(подпись)

## Аннотация рабочей программы дисциплины

Дисциплина “**Физико-химические свойства органических веществ**” входит в вариативную часть обязательных дисциплин 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-2, ПК-3.

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:

Семестр	Учебные занятия						СРС, в том числе экзамен	Форма промежуточной аттестации (зачет, дифференцированный зачет, экзамен)
	в том числе							
	Контактная работа обучающихся с преподавателем							
	Все го	из них						
Лекции		Лабораторные занятия	Практ. занятия	КСР	Консульт			
3	108	12	20	-	-	-	76	зачет

### 1. Цели освоения дисциплины

Преподавание дисциплины “Физико-химические свойства органических веществ” 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 оборудований и оптимизации технологических процессов.

## 2. Место дисциплины в структуре ООП магистратуры

Дисциплина “Физико-химические свойства органических веществ” входит в вариативную часть обязательных дисциплин образовательной программы *магистратуры* 04.04.01 Химия.

Курс “Физико-химические свойства органических веществ” 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).

Компетенции	Формулировка компетенции из ФГОС ВО	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)
ПК-2	Владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии	<b>Знать:</b> теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ <b>Уметь:</b> правильно применить тот или иной метод расчета и прогнозирования физико-химических характеристик органических веществ, для решения конкретных практических задач. Уметь использовать уравнение состояния для расчета термодинамических свойств веществ <b>Владеть:</b> теоретическими знаниями по химической термодинамике и основами компьютерной техники расчетов физико-химических свойств органических веществ
ПК-3	Готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований	<b>Знать:</b> современные экспериментальные методы определения физико-химических свойств органических материалов, знать теоретические основы этих методов <b>Уметь:</b> при необходимости проводить эксперимент по определению физико-химических свойств органических материалов, уметь оценить точность

		измерений физико-химических свойств <b>Владеть:</b> основами техники основных физических параметров таких как температура, давление, плотность, поверхностное натяжение, теплоемкость, вязкость, теплопроводность, показатель преломления и т.д.
--	--	---

#### 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 семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лек	Практ	Лаб	Конт. раб.		
<b>Модуль 1. Теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ</b>									
1	Теоретически обоснованные уравнения состояния органических веществ	3		2		2		12	Устный опрос, письменный опрос
2	Расчетно-теоретические методы определения физико-химических свойств органических веществ. Эмпирические уравнения состояния	3		1		2		12	Устный опрос, письменный опрос
3	Методы прогнозирования физико-химических свойств органических веществ	3		1		2		12	Устный опрос, письменный опрос
	<i>Итого по модулю 1:</i>	36		4		6		26	коллоквиум
<b>Модуль 2. Экспериментальные методы определения физико-химических свойств органических веществ</b>									
4	Методы измерения температуры, давления, плотности	3		1		2		6	Устный опрос, письменный опрос
5	Методы измерения давления насыщенных паров	3		1		2		6	Устный опрос, письменный опрос
6	Методы измерения калорических	3		1		2		6	Устный опрос, письменный опрос

7	свойств (теплоемкости, энтальпии, теплоты сгорания) и поверхностных свойств (поверхностного натяжения) Методы измерения транспортных свойств (вязкости, теплопроводности, коэффициента диффузии) <i>Итого по модулю 2:</i>	36	2	2	5	Устный опрос, письменный опрос
	Всего:		5	8	23	коллоквиум
<b>Модуль 3. Методы оценки погрешностей физико-химических свойств органических веществ</b>						
8	Основные понятия и теория оценки погрешности измерений физико-химических свойств	3	1	3	14	Устный опрос, письменный опрос
9	Стандартные программы для расчета справочных данных о свойствах органических веществ (REF-PROP/TRC/NIST и Aspen Plus)	3	1	4	13	Устный опрос, письменный опрос
	<i>Итого по модулю 2:</i>	36	2	7	27	коллоквиум
	Всего:	108	11	21	76	зачет

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

##### **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. Определения 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

### **Лабораторные работы**

Названия разделов и тем	Цель и содержание лабораторной работы	Результаты лабораторной работы
Лабораторная работа №1. Расчет термодинамических (термических и калорических) свойств веществ с помощью уравнения состояния		
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).	Освоить расчетный метод основных термодинамических (калорических, объемных, акустических) свойств органических веществ на основе уравнения состояния	Проведение практических расчетов калорических и термических свойств веществ на основе различных уравнений состояния для органических веществ.
Лабораторная работа №2 . Расчет критических параметров чистых веществ с помощью		

уравнения состояния		
<p>Модуль 1. Теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ</p> <p>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</p>	<p>Освоить расчетный метод термодинамических свойств и критических параметров чистых органических веществ на основе уравнения состояния Редлиха-Квонга, Сова, Пенга-Робинсона.</p>	<p>Рассчитать критические параметры чистых органических веществ с помощью Редлиха-Квонга, Сова, Пенга-Робинсона. Таити связь критических параметров с константами этих уравнений</p>
<p>Лабораторная работа №3. Предсказание термодинамических свойств чистых веществ на основе принципа соответственных состояний</p>		
<p>Модуль 1. Теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ</p> <p>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</p>	<p>Освоить расчетный метод неизвестных термодинамических свойств органических веществ (прогнозирование) по минимум известным данным (по критическим параметрам)</p>	<p>Рассчитать для ряда органических веществ термодинамические свойства, используя только критические их параметры. Сравнить полученные данные с прямыми экспериментальными данными или стандартными данными с целью оценки точности прогнозирования</p>
<p>Лабораторная работа №4. Измерения термических свойств органических веществ</p>		
<p>Модуль 2. Экспериментальные методы определения физико-химических свойств органических веществ</p> <p>Тема 4. Методы измерения температуры, давления, плотности. Метод колеблющей трубки. Денсиметр. Метод пьезометра постоянного и переменного объемов. Метод Архимеда</p>	<p>Освоить на практике методы измерения температуры, давления, определения плотности, используя закон Архимеда или пикнометра</p>	<p>Определить температуру и давление системы, используя различные техники измерений. Измерить плотность различных органических жидкостей (например n-алканов) с помощью пикнометра, используя закон Архимеда</p>
<p>Лабораторная работа №5. Измерения термических свойств органических веществ</p>		



<p>Модуль 2. Экспериментальные методы определения физико-химических свойств органических веществ Тема 5. Методы измерения давления насыщенных паров. Динамический метод. Статический метод. Изопиестик метод.</p>	<p>Освоить экспериментальные методы измерения давления насыщенных паров органических веществ</p>	<p>Измерить давление насыщенных паров, используя статический метод и метод пьезометра постоянного объема. Оценить погрешности измерения</p>
<p>Лабораторная работа №6. Измерения калорических свойств органических веществ</p>		
<p>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</p>	<p>Освоить экспериментальные методы измерения теплоемкости и поверхностного натяжения жидких органических веществ</p>	<p>Измерить теплоемкость и поверхностное натяжение n-алканов при комнатной температуре и атмосферном давлении, используя метод адиабатического калориметра и капиллярного подъема и метод лежащей капли. Оценить погрешности измерения</p>
<p>Лабораторная работа №7. Измерения транспортных свойств органических веществ</p>		
<p>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</p>	<p>Освоить метод капиллярного течения для измерения вязкости жидких органических веществ</p>	<p>Измерить вязкость n-алканов при комнатной температуре и атмосферном давлении, используя VPZh-3 капиллярный вискозиметр. Оценить погрешность измерений</p>
<p>Лабораторная работа №8. Оценка погрешностей экспериментальных измерений термодинамических свойств веществ</p>		
<p>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</p>	<p>Освоить технику оценки точности экспериментальных методов измерений термодинамических и транспортных свойств веществ</p>	<p>Определить погрешности измерений термодинамических и транспортных свойств веществ, используя рабочее уравнение и погрешностей отдельных измеряемых величин. Определить ошибки отнесения связанные с неточностью измерений температуры, давления, концентрации</p>

данных.		
Лабораторная работа №9. Построить фазовые диаграммы (двухмерные и трехмерные термодинамические поверхности) в разных плоскостях, используя стандартные программы REFPROP (TRC/NIST)		
<p>Модуль 3. Методы оценки погрешностей физико-химических свойств органических веществ</p> <p>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</p>	<p>Освоить основу использования стандартной программы REFPROP для расчета термодинамических и транспортных свойств стандартных веществ и построение фазовых диаграмм</p>	<p>Построить фазовые диаграммы и двух- и трехмерные термодинамические поверхности различных свойств чистых веществ, используя стандартные программы REFPROP</p>

## 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

### 6.1. 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.

## 6.2. 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 теплоемкости 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. 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.

Компетенция ПК-2	Знания, умения, навыки	Процедура освоения Устный опрос, тестирование Круглый стол  коллоквиум
	<p><b>Знать:</b> теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ</p> <p><b>Уметь:</b> правильно применить тот или иной метод расчета и прогнозирования физико-химических характеристик органических веществ, для решения конкретных практических задач. Уметь использовать уравнение состояния для расчета термодинамических свойств веществ</p> <p><b>Владеть:</b> теоретическими знаниями по химической термодинамике и основами компьютерной техники расчетов физико-химических свойств органических веществ</p>	
ПК-3	<b>Знать:</b> современные экспериментальные методы определения физико-химических свойств органических материалов, знать теоретические основы этих методов	Устный опрос, тестирование
	<b>Уметь:</b> при необходимости проводить эксперимент по определению физико-химических свойств органических материалов, уметь оценить точность измерений физико-химических	Круглый стол

свойств <b>Владеть:</b> основами техники основных физических параметров таких как температура, давление, плотность, поверхностное натяжение, теплоемкость, вязкость, теплопроводность, показатель преломления и т.д.	Коллоквиум, конференция
---	----------------------------

## 7.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций, описание шкал оценивания.

### ПК-2 – Владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии

Уровень	Показатели (что обучающийся должен продемонстрировать)	Оценочная шкала		
		Удовлетворительно	Хорошо	Отлично
пороговый	<b>Знать:</b> теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ	Не полностью знает теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ	Знает теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ, но допускает ошибки	Знает в полном теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ
	<b>Уметь:</b> правильно применить тот или иной метод расчета и прогнозирования физико-химических характеристик органических веществ, для решения конкретных практических задач. Уметь использовать уравнение состояния для расчета термодинамических свойств веществ	Умеет правильно применить тот или иной метод расчета и прогнозирования физико-химических характеристик органических веществ, для решения конкретных практических задач. Уметь использовать уравнение состояния для расчета термодинамических свойств веществ	Умеет на практике правильно применить тот или иной метод расчета и прогнозирования физико-химических характеристик органических веществ, для решения конкретных практических задач. Уметь использовать уравнение состояния для расчета термодинамических свойств веществ, но при этом допускает небольшие ошибки из-за невнимательности	Умеет не только правильно применить тот или иной метод расчета и прогнозирования физико-химических характеристик органических веществ, для решения конкретных практических задач, но и самостоятельно интерпретировать и анализировать полученные решения
	<b>Владеть:</b> теоретическими знаниями по	Частично владеет теоретически	Владеет в целом теоретическими	Полностью владеет теоретически

	химической термодинамике и основами компьютерной техники расчетов физико-химических свойств органических веществ	скими знаниями по химической термодинамике и основами компьютерной техники расчетов физико-химических свойств органических веществ	знаниями по химической термодинамике и основами компьютерной техники расчетов физико-химических свойств органических веществ	ми знаниями по химической термодинамике и основами компьютерной техники расчетов физико-химических свойств органических веществ
базовый	<b>Знать:</b> теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ	Не полностью знает теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ	Знает теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ, но допускает ошибки	Знает в полном теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ
	<b>Уметь:</b> правильно применить тот или иной метод расчета и прогнозирования физико-химических характеристик органических веществ, для решения конкретных практических задач. Уметь использовать уравнение состояния для расчета термодинамических свойств веществ	Умеет правильно применить тот или иной метод расчета и прогнозирования физико-химических характеристик органических веществ, для решения конкретных практических задач. Уметь использовать уравнение состояния для расчета термодинамических свойств веществ	Умеет на практике правильно применить тот или иной метод расчета и прогнозирования физико-химических характеристик органических веществ, для решения конкретных практических задач. Уметь использовать уравнение состояния для расчета термодинамических свойств веществ, но при этом допускает небольшие ошибки из-за невнимательности	Умеет не только правильно применить тот или иной метод расчета и прогнозирования физико-химических характеристик органических веществ, для решения конкретных практических задач, но и самостоятельно интерпретировать и анализировать полученные решения
	<b>Владеть:</b> теоретическими знаниями по химической термодинамике и основами компьютерной техники расчетов физико-химических свойств органических веществ	Частично владеет теоретическими знаниями по химической термодинамике и основами компьютерной техники расчетов	Владеет в целом теоретическими знаниями по химической термодинамике и основами компьютерной техники расчетов физи-	Полностью владеет теоретическими знаниями по химической термодинамике и основами компьютерной техники расчетов физико-

	ских веществ	физико-химических свойств органических веществ	ко-химических свойств органических веществ	химических свойств органических веществ
про- двину- тый	<b>Знать:</b> теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ	Не полностью знает теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ	Знает теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ, но допускает ошибки	Знает в полном теоретические основы методов определения физико-химических свойств органических веществ
	<b>Уметь:</b> правильно применить тот или иной метод расчета и прогнозирования физико-химических характеристик органических веществ, для решения конкретных практических задач. Уметь использовать уравнение состояния для расчета термодинамических свойств веществ	Умеет правильно применить тот или иной метод расчета и прогнозирования физико-химических характеристик органических веществ, для решения конкретных практических задач. Уметь использовать уравнение состояния для расчета термодинамических свойств веществ	Умеет на практике правильно применить тот или иной метод расчета и прогнозирования физико-химических характеристик органических веществ, для решения конкретных практических задач. Уметь использовать уравнение состояния для расчета термодинамических свойств веществ, но при этом допускает небольшие ошибки из-за невнимательности	Умеет не только правильно применить тот или иной метод расчета и прогнозирования физико-химических характеристик органических веществ, для решения конкретных практических задач, но и самостоятельно интерпретировать и анализировать полученные решения
	<b>Владеть:</b> теоретическими знаниями по химической термодинамике и основами компьютерной техники расчетов физико-химических свойств органических веществ	Частично владеет теоретическими знаниями по химической термодинамике и основами компьютерной техники расчетов физико-химических свойств органических веществ	Владеет в целом теоретическими знаниями по химической термодинамике и основами компьютерной техники расчетов физико-химических свойств органических веществ	Полностью владеет теоретическими знаниями по химической термодинамике и основами компьютерной техники расчетов физико-химических свойств органических веществ

ПК-3 - Готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований

Уровень	Показатели (что обучающийся должен продемонстрировать)	Оценочная шкала		
		Удовлетворительно	Хорошо	Отлично
пороговый	<b>Знать:</b> современные экспериментальные методы определения физико-химических свойств органических материалов, знать теоретические основы этих методов	Не полностью разбирается в современных экспериментальных методах определения физико-химических свойств органических материалов, и не полностью знает теоретические основы этих методов	Разбирается в современных экспериментальных методах определения физико-химических свойств органических материалов, и знает теоретические основы этих методов	Полностью разбирается в современных экспериментальных методах определения физико-химических свойств органических материалов, и полностью знает теоретические основы этих методов
	<b>Уметь:</b> при необходимости проводить эксперимент по определению физико-химических свойств органических материалов, уметь оценить точность измерений физико-химических свойств	Затрудняется проводить эксперимент по определению физико-химических свойств органических материалов и оценить точность измерений физико-химических свойств	Умеет проводить эксперимент по определению физико-химических свойств органических материалов и оценить точность измерений физико-химических свойств	Умеет грамотно и самостоятельно проводить эксперимент по определению физико-химических свойств органических материалов, оценить точность измерений физико-химических свойств
	<b>Владеть:</b> основами техники измерений основных физических параметров, таких как, температура, давление, плотность, поверхностное натяжение, теплоемкость, вязкость, теплопроводность, показатель преломления и т.д.	Плохо владеет основами техники измерений физических параметров, таких как, температура, давление, плотность, поверхностное натяжение, теплоемкость, вязкость, теплопроводность, показатель преломления и т.д.	Не в полной мере владеет основами техники измерений физических параметров, таких как, температура, давление, плотность, поверхностное натяжение, теплоемкость, вязкость, теплопроводность, показатель преломления и т.д.	Владеет в совершенстве основами техники измерений физических параметров, таких как, температура, давление, плотность, поверхностное натяжение, теплоемкость, вязкость, теплопроводность, показатель преломления и т.д.



			т.д.	
базовый	<b>Знать:</b> современные экспериментальные методы определения физико-химических свойств органических материалов, знать теоретические основы этих методов	Не полностью разбирается в современных экспериментальных методах определения физико-химических свойств органических материалов, и не полностью знает теоретические основы этих методов	Разбирается в современных экспериментальных методах определения физико-химических свойств органических материалов, и знает теоретические основы этих методов	Полностью разбирается в современных экспериментальных методах определения физико-химических свойств органических материалов, и полностью знает теоретические основы этих методов
	<b>Уметь:</b> при необходимости проводить эксперимент по определению физико-химических свойств органических материалов, уметь оценить точность измерений физико-химических свойств	Затрудняется проводить эксперимент по определению физико-химических свойств органических материалов и оценить точность измерений физико-химических свойств	Умеет проводить эксперимент по определению физико-химических свойств органических материалов и оценить точность измерений физико-химических свойств	Умеет грамотно и самостоятельно проводить эксперимент по определению физико-химических свойств органических материалов, оценить точность измерений физико-химических свойств
	<b>Владеть:</b> основами техники измерений основных физических параметров, таких как, температура, давление, плотность, поверхностное натяжение, теплоемкость, вязкость, теплопроводность, показатель преломления и т.д.	Плохо владеет основами техники измерений физических параметров, таких как, температура, давление, плотность, поверхностное натяжение, теплоемкость, вязкость, теплопроводность, показатель преломления и т.д.	Не в полной мере владеет основами техники измерений физических параметров, таких как, температура, давление, плотность, поверхностное натяжение, теплоемкость, вязкость, теплопроводность, показатель преломления и т.д.	Владеет в совершенстве основами техники измерений физических параметров, таких как, температура, давление, плотность, поверхностное натяжение, теплоемкость, вязкость, теплопроводность, показатель преломления и т.д.
продвинутый	<b>Знать:</b> современные экспериментальные методы определения физико-химических	Не полностью разбирается в современных экспериментальных	Разбирается в современных экспериментальных мето-	Полностью разбирается в современных экспериментальных мето-

свойств органических материалов, знать теоретические основы этих методов	тальных методах определения физико-химических свойств органических материалов, и не полностью знает теоретические основы этих методов	дах определения физико-химических свойств органических материалов, и знает теоретические основы этих методов	дах определения физико-химических свойств органических материалов, и полностью знает теоретические основы этих методов
<b>Уметь:</b> при необходимости проводить эксперимент по определению физико-химических свойств органических материалов, уметь оценить точность измерений физико-химических свойств	Затрудняется проводить эксперимент по определению физико-химических свойств органических материалов и оценить точность измерений физико-химических свойств	Умеет проводить эксперимент по определению физико-химических свойств органических материалов и оценить точность измерений физико-химических свойств	Умеет грамотно и самостоятельно проводить эксперимент по определению физико-химических свойств органических материалов, оценить точность измерений физико-химических свойств
<b>Владеть:</b> основами техники измерений основных физических параметров, таких как, температура, давление, плотность, поверхностное натяжение, теплоемкость, вязкость, теплопроводность, показатель преломления и т.д.	Плохо владеет основами техники измерений физических параметров, таких как, температура, давление, плотность, поверхностное натяжение, теплоемкость, вязкость, теплопроводность, показатель преломления и т.д.	Не в полной мере владеет основами техники измерений физических параметров, таких как, температура, давление, плотность, поверхностное натяжение, теплоемкость, вязкость, теплопроводность, показатель преломления и т.д.	Владеет в совершенстве основами техники измерений физических параметров, таких как, температура, давление, плотность, поверхностное натяжение, теплоемкость, вязкость, теплопроводность, показатель преломления и т.д.

### 7.3. Типовые контрольные задания

#### Формы контроля и критерии оценок

Формы контроля: текущий контроль (систематический учет знаний и активность студентов на занятиях), промежуточный контроль по модулю (рубежная контрольная работа по пройденному блоку тем) и итоговой контроль

(экзамен). Текущий контроль осуществляется в виде устного опроса, тестирования, проведения коллоквиума, обсуждения реферата, проверки домашнего задания.

Оценка текущего контроля включает 70 баллов:

- допуск к выполнению лабораторных работ (10 баллов);
- выполнение и сдача лабораторных работ (20 баллов);
- тестирование (10 баллов);
- выполнение контрольной работы (с включением задач) – 20 баллов.

Промежуточный контроль (в виде контрольной работы или коллоквиума) оценивается в 30 баллов.

Итоговый контроль (100 баллов) проводится в виде устного собеседования или в виде письменного теста, содержащего вопросы по всем разделам курса “Корреляционный анализ органических соединений на основе газожидкостной хроматографии”, изучавшим в процессе семестра. Среднее число баллов по всем модулям, которое дает право получения положительной оценки без итогового контроля знаний – 51 и выше.

### **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 изоэстетик 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  $\Delta m = 0.001 \text{ g}$ , соответственно?

8. Рассчитать ошибки определения молекулярного веса  $M$  метана из уравнения состояния идеального газа  $P = (g/M)RT/V$ , если при  $t = 25 \pm 1$  °С,  $V = 210 \pm 2$  мл,  $g = 137 \pm 2$  мг,  $P = 735 \pm 1$  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  $G = 0.5478 \pm 0.0003$  г,  $Y = 0.020 \pm 0.001$  г масса проволоки, наблюдаемое увеличение температуры  $t = 1.57 \pm 0.01$  °С, и количество воды в калориметр  $W = 1875 \pm 2$  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  $\phi_v$ , если молялит  $m = 0.15 \pm 0.01$ ,  $\rho = 1010 \pm 0.05$  кг/м<sup>3</sup> и  $\rho_1 = 999 \pm 0.01$  кг/м<sup>3</sup>.

### Контрольные вопросы к зачету

11. Какова связь между потенциальной функцией межмолекулярных взаимодействий и уравнением состояния вещества?
12. Связь между потенциальной функцией межмолекулярных взаимодействий и вириальными коэффициентами?
13. Получить выражения для второго вириального коэффициента из уравнений Ван-дер-Ваальса.
14. Получить выражения для второго вириального коэффициента используя простейшие потенциальные функции (например, Леннарда-Джонса потенциал или потенциал прямоугольной ямы).
15. Получить связь между термодинамическими функциями и вириальными коэффициентами.
16. Вывести формулу для изохорной теплоемкости Ван-дер-Ваальсовского газа.
17. Получить выражение для давления насыщенных паров из уравнения Ван-дер-Ваальса.
18. Получить выражение для уравнения плотности насыщенной жидкости и пара из уравнения Ван-дер-Ваальса.
19. Как определить параметры модельных потенциалов межмолекулярных взаимодействий из экспериментальных данных о термодинамических свойствах веществ?
20. Как можно предсказать свойства веществ на основе принципа соответственных состояний?
21. Какие существуют методы измерений давления?

22. Каковы физические основы метода измерения плотности жидкостей на основе закона Архимеда (пикнометрический метод)?
23. В чем заключается физическая суть метода измерения вязкости методом капиллярного течения?
24. Какие поправки надо ввести в рабочее уравнение для измерения вязкости методом капиллярного течения?
25. Физические основы метода измерения теплоемкости жидкостей методом адиабатического калориметра
26. Написать рабочее уравнение для определения поверхностного натяжения методом капиллярного поднятия
27. Физические основы изопиестик метода измерения давления насыщенных паров. Погрешности измерения метода
28. 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?
29. В чем заключается физическая суть методов (динамического и статистического) измерения давления насыщенных паров?
30. Конструкция калориметрической бомбы и ее основные характеристики для определения теплоты сгорания. Методы определения энтальпии химических реакций.
31. Метод колеблющей проволоки для измерения вязкости жидкостей и его точность. Как зависит точность метода от геометрических и других характеристик измерительной ячейки?
32. Что вносит основной вклад в погрешность метода вакуумного адиабатического калориметра при измерении теплоемкости жидкостей?
33. Как определить погрешности экспериментальных методов определения термодинамических свойств веществ?
34. Как определить погрешности экспериментальных методов определения термодинамических свойств веществ?
35. Что такое стандартное отклонение и как оно определяется?
36. Как определяется среднее абсолютное отклонение?
37. Что такое ошибка отнесения и как она определяется?
38. Определить ошибки измерения плотности  $\rho = m/V$ , если ошибка измерения объема и массу составляет  $\Delta V = 0.03 \text{ cm}^3$  и  $\Delta m = 0.001 \text{ g}$ , соответственно?
39. Рассчитать ошибки определения молекулярного веса  $M$  метана из уравнения состояния идеального газа  $P = (g/M)RT/V$ , если при  $t = 25 \pm 1 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $V = 210 \pm 2 \text{ мл}$ ,  $g = 137 \pm 2 \text{ мг}$ ,  $P = 735 \pm 1 \text{ мм ртутного столба}$ ?
40. Рассчитать ошибки определения молекулярного веса  $M$  метана из уравнения состояния идеального газа?
41. Рассчитать теплоемкость калориметрической бомбы и ее погрешность, обусловленную ошибками измеряемых величин, используя соотношение  $C_b = (6315G + 1600Y)/t - 0.999W$ , где количество бензойной кислоты

$G=0.5478\pm 0.0003$  г,  $Y=0.020\pm 0.001$  г масса проволоки, наблюдаемое увеличение температуры  $t=1.57\pm 0.01$  °С, и количество воды в калориметр  $W=1875\pm 2$  г.

42. 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  $\phi_v$ , если молялит  $m=0.15\pm 0.01$ ,  $\rho = 1010 \pm 0.05$  кг/м<sup>3</sup> и  $\rho_1 = 999 \pm 0.01$  кг/м<sup>3</sup>.

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

### а) основная

1. Пригожин И., Дефей Р. Химическая термодинамика. Новосибирск: СО Наука. 1966. 512 с.
2. Кричевский И.К. Фазовое равновесие в растворах при высоких давлениях. М.-Л., Госхимиздат. 1952. 168 с.
3. Смирнова Н.А. Методы статистической термодинамики и физической химии. М.: Высшая школа. 1973. 479 с.
4. Морачевский А.Г., Смирнова Н.А., Питровская Е.М. и др. Термодинамика равновесия жидкость-пар. //Под ред. А.Г.Морачевского, Ленинград. Химия. 1989. 344 с.
5. Лебедев Ю.А., Мирошниченко Е.А. Термохимия парообразования органических веществ. М.: Наука, 1981. 216 с.
7. Морачевский А.Г., Смирнова Н.А., Балашова И.М., Пукинский И.В. Термодинамика разбавленных растворов неэлектролитов. Ленинград. Химия. 1982. 240 с.
6. Суворов А.В. Термодинамическая химия парообразного состояния. Л.: Химия. 1970. 208 с.
7. Коган В.Б., Фридман В.М., Кафаров В.В. Равновесие между жидкостью и паром. М. Л.: Наука. 1966. Т.1. 642 с.
8. Рид Р., Праусниц Ж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. Л., Химия. 1982. 592 с.
9. Уэйлес С. Фазовые равновесия в химических технологиях. М.: Мир. 1989. Часть 1 и 2.

### б) дополнительная

1. Гиббс Д.В. термодинамика. Статистическая механика. М.: Наука, 1982.
2. Валяшко В.М. Фазовые равновесия и свойства гидротермальных систем. М.: Наука. 1990. 270 с.

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

1. Электронные образовательные ресурсы образовательного сервера ДГУ [elib.dgu.ru](http://elib.dgu.ru)
2. <http://www.biblioclub.ru>
3. Каталог образовательных интернет-ресурсов <http://www.edu.ru/>
4. Химический каталог: Химические ресурсы Рунета <http://www.ximicat.com/>
5. Портал фундаментального химического образования России <http://www.chemnet.ru>
6. XuMuK: сайт о химии для химиков <http://www.xumuk.ru/>
7. <http://elibrary.ru/defaultx.asp>

## **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 ситуации;
- 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 ор-	Определить физико-химических свойства органических веществ на основе струк-

<p>ганических 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</p>	<p>турных данных и межмолекулярные сил используя простейшие потенциальные функции как потенциал Леннарда-Джонса. Рассчитать на основе принцип соответственных состояний термодинамические функции чистых органических соединений и сравнить предсказанные свойства с экспериментом и расчетами из уравнений состояния.</p>
<p>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</p>	<p>Вывести рабочие уравнения для методов измерения плотности (пьезометра постоянного и переменного объемов, метод колеблющей трубки и метод Архимеда). Рассчитать для этих методов погрешности измерений.</p>
<p>Модуль 2. Экспериментальные методы определения физико-химических свойств органических веществ Тема 5. Методы измерения давления насыщенных паров. Динамический метод. Статистический метод. Изопиестик метод.</p>	<p>Вывести рабочее уравнение для метода измерения давления насыщенных паров (динамический метод, статистический метод, изопиестик метод). Оценить погрешностей измерений каждым из этих методов и сравнить их.</p>
<p>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</p>	<p>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.</p>
<p>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</p>	<p>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.</p>
<p>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</p>	<p>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.</p>
<p>Модуль 3. Методы оценки погрешностей физико-химических свойств органических ве-</p>	<p>Построить двухмерные и трехмерные фазовые диаграммы органических соедине-</p>

<p>ществ 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.</p>	<p>ний 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.)</p>
---	---

### **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:

- Занятия компьютерного тестирования.
- Демонстрационный материал применением проектора и интерактивной доски.
- Компьютерные программы для статистической обработки результатов анализа.
- Программы пакета Microsoft Office

### **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 компьютерном классе.