

Специальность / Speciality:

6-05-0531-01Химия / 6-05-0531-01Chemistry

Учебная дисциплина, модуль / Academic discipline, module:

Методы расчета физико-химических свойств веществ/ Calculating methods of the physico-chemical properties of substances

Краткое содержание учебной дисциплины, модуля / Brief summary	Курс посвящен изучению теоретических основ методов расчета термодинамических и физико-химических свойств веществ на основании молекулярных и спектральных данных этих соединений, проведению практических расчетов термодинамических и физико-химических свойств веществ исходя из результатов фундаментальных исследований зависимости свойств веществ от их строения.	The course is devoted to the study of the theoretical methods for calculating the thermodynamic and physicochemical properties of substances based on the molecular and spectral data of these compounds, carrying out practical calculations of the thermodynamic and physicochemical properties of substances based on the results of fundamental studies of the dependence of the properties of substances on their structure.
Формируемые компетенции / The formed competences	СК-12. Применять химические и физико-химические методы анализа для решения производственных и экспертных задач в области идентификации и определения основных компонентов в объектах природного и синтетического происхождения. СК-15. Применять экспериментальные и расчетные методы физической химии при оценке термодинамических параметров и кинетических закономерностей химических реакций	SC-12. Apply chemical and physicochemical methods of analysis to solve production and expert problems in the field of identification and determination of the main components in natural and synthetic objects. SC-15. Apply experimental and computational methods of physical chemistry in estimated thermodynamic parameters and kinetic patterns of chemical reactions
Результаты обучения	<b>знать:</b>	<b>know:</b>

<p>(знать, уметь, владеть) / Learning outcomes (know, can, be able)</p>	<p>– основные теоретические положения расчетных методов, базирующихся на фундаментальных физических теориях;</p> <p>- теоретические основы сравнительных методов расчетов термодинамических и физико-химических свойств веществ;</p> <p>– аддитивные методы расчета физико-химических свойств, базирующихся на классической теории строения молекул;</p> <p>– методы практических расчетов физических, физико-химических и термодинамических свойств;</p> <p><b>уметь:</b></p> <p>– на основании анализа литературных данных и предварительных расчетов (квантово-химические расчеты, расчеты методом молекулярной механики) получать исходные молекулярные и спектральные данные, необходимые для определения термодинамических свойств веществ методом статистической термодинамики;</p> <p>– рассчитывать статистические суммы и термодинамические функции соединений в состоянии идеального газа в широком интервале температур методом статистической термодинамики;</p> <p>– использовать сравнительные расчетные схемы;</p> <p>– выделять инкременты замены в органических соединениях органического строения;</p> <p>– выполнять практические расчеты свойств веществ с использованием аддитивных методов.</p> <p><b>владеть:</b></p>	<p>– basic theoretical principles of calculation methods based on fundamental physical theories;</p> <p>- theoretical foundations of comparative methods for calculating thermodynamic and physicochemical properties of substances;</p> <p>– additive methods for calculating physicochemical properties based on the classical theory of molecular structure;</p> <p>– methods of practical calculations of physical, physicochemical and thermodynamic properties;</p> <p><b>Can:</b></p> <p>– to obtain the initial molecular and spectral data necessary to determine the thermodynamic properties of substances by the method of statistical thermodynamics based on the analysis of literature data and preliminary calculations (quantum chemical calculations, calculations by the method of molecular mechanics);</p> <p>– to calculate statistical sums and thermodynamic functions of compounds in the ideal gas state over a wide temperature range using statistical thermodynamics;</p> <p>– use comparative calculation schemes;</p> <p>– to find replacement increments in organic compounds of organic structure;</p> <p>– perform practical calculations of the properties of substances using additive methods.</p> <p><b>be able:</b></p> <p>– to make schemes for calculating thermodynamic and physico-chemical properties of substances;</p> <p>– to evaluate the accuracy of the obtained physico-</p>
-----------------------------------------------------------------------------	-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

	<p>– методологией составления схемы расчета термодинамических и физико-химических свойств веществ;</p> <p>– способами оценки точности полученных численных значений величин физико-химических свойств.</p>	chemical properties.
Семестр изучения учебной дисциплины, модуля / Semester of study	6 семестр	6 Semester
Препреквизиты / Prerequisites	Курс «Физическая химия»	The course "Physical Chemistry"
Трудоемкость в зачетных единицах (кредитах) / Creditunits	3 з.е.	3 credit units
Количество аудиторных часов и часов самостоятельной работы / Academic hour of students' classwork, hours of self-directed learning	50 аудиторных часа, управляемая самостоятельная работа – 4 часа.	Academic hour of students' classwork - 50, hours of self-directed learning – 4.
Требования и формы текущей и промежуточной аттестации / Requirements and forms of current and interim certification	Форма аттестации - зачет Промежуточная аттестация – 2 самостоятельные работы по решению задач	Forms of certification – test; interim certification – 2 individual work.