

УТВЕРЖДАЮ:
Начальник Управления подготовки
кадров высшей квалификации

“ 26 ” августа 2019 г.

**Лист актуализации
рабочей программы и фонда оценочных средств учебной дисциплины
«Термохимия биологических процессов»
на 2019/2020 учебный год**

для подготовки кадров высшей квалификации
по направлению подготовки 06.06.01 Биологические науки
направленность программы «Биохимия»

Учебная программа и фонд оценочных средств учебной дисциплины «Термохимия биологических процессов» не претерпели изменений, пересмотрены и одобрены на заседании кафедры химии протокол от «26» августа 2019 г. № 01

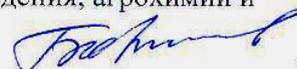
Заведующая кафедрой



И.И. Дмитриевская

СОГЛАСОВАНО:

Председатель учебно-методической комиссии факультета почвоведения, агрохимии и экологии, кандидат химических наук, доцент Бочкарев А.В.



протокол заседания УМК от «26» августа 2019 г. № 09

Начальник учебно-методического отдела
подготовки кадров высшей квалификации УПК ВК



С.А. Дикарева



МИНИСТЕРСТВО СЕЛЬСКОГО ХОЗЯЙСТВА РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«РОССИЙСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ АГРАРНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ –
МСХА имени К.А. ТИМИРЯЗЕВА»
(ФГБОУ ВО РГАУ - МСХА имени К.А. Тимирязева)

Факультет почвоведения, агрохимии и экологии
Кафедра химии

УТВЕРЖДАЮ:
Проректор по науке
и инновационному развитию

 С.Л. Белопухов
“30” августа 2018 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.ДВ.01.01 ТЕРМОХИМИЯ БИОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ**

для подготовки кадров высшей квалификации
по программе подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре
Биохимия

ФГОС ВО (уровень подготовки кадров высшей квалификации)

Направление подготовки: 06.06.01 Биологические науки

Год обучения 2

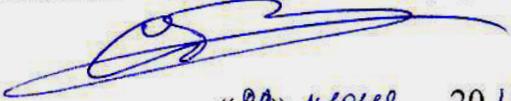
Семестр обучения 4

Язык преподавания русский

Москва, 2018

Автор рабочей программы:

Белопухов Сергей Леонидович, кандидат химических наук, доктор сельскохозяйственных наук, профессор

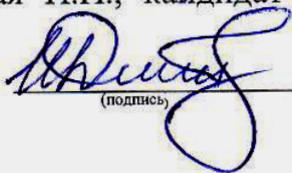

«28» июня 2018 г.

Рабочая программа предназначена для преподавания дисциплины Блока I «Дисциплины (модули)» аспирантам очной формы обучения.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО (уровень подготовки кадров высшей квалификации) по направлению подготовки 06.06.01 Биологические науки, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 30.07.2014 г. № 871 и зарегистрированного в Минюсте России 20.08.2014 г. №33686.

Программа обсуждена на заседании кафедры химии протокол от «28» июня 2018 г. № 06

Зав. кафедрой Дмитриевская И.И., кандидат сельскохозяйственных наук, доцент


(подпись)

«28» июня 2018 г.

Рецензент Постников Д.А., д.б.н., профессор
(ФИО, ученая степень, ученое звание)


(подпись)

Проверено:

Начальник учебно-методического отдела
подготовки кадров высшей квалификации
Управления кадров высшей квалификации


(подпись)

С.А. Дикарева

Согласовано:

Декан факультета почвоведения, агрохимии и экологии,
д.б.н., профессор Борисов Б.А.


(подпись)

«28» июня 2018 г.

Программа обсуждена на заседании Ученого совета факультета почвоведения, агрохимии и экологии протокол от «28» июня 2018 г. № 2016

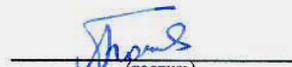
Секретарь ученого совета факультета Елисеева О.В., к.б.н., доцент


(подпись)

«28» июня 2018 г.

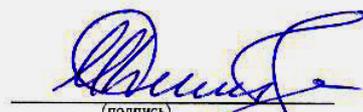
Программа принята учебно-методической комиссией факультета почвоведения, агрохимии и экологии протокол от «28» июня 2018 г. № 06

Председатель учебно-методической комиссии
Бочкарев А.В., к.х.н., доцент


(подпись)

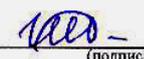
«28» июня 2018 г.

Заведующий кафедрой
Дмитревская И.И. к.с.-х.н., доцент


(подпись)

«28» июня 2018 г.

 Отдел комплектования ЦНБ


(подпись) Е.А. Комарова

Содержание

АННОТАЦИЯ	5
1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ).....	6
2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП.....	7
3. ОБЩАЯ ТРУДОЕМКОСТЬ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ).....	8
4. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ.....	8
5. ВХОДНЫЕ ТРЕБОВАНИЯ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ), ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ.....	10
6. ФОРМАТ ОБУЧЕНИЯ.....	10
7. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ), ВИДЫ УЧЕБНЫХ ЗАНЯТИЙ И ФОРМ ИХ ПРОВЕДЕНИЯ.....	10
7.1 Распределение трудоёмкости дисциплины (модуля) по видам работ.....	10
7.2 Содержание дисциплины (модуля).....	11
7.3 Образовательные технологии.....	16
7.4 Перечень вопросов для самостоятельного изучения дисциплины (модуля).....	27
7.5 Контрольные работы /рефераты.....	19
8. ФОРМА ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ И ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ.....	30
9. РЕСУРСНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ.....	32
9.1 Перечень основной литературы.....	32
9.2 Перечень дополнительной литературы.....	33
9.3 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет».....	33
9.4 Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса.....	34
9.5 Описание материально-технической базы.....	34
9.5.1 Требования к аудиториям.....	34
9.5.2 Требования к специализированному оборудованию.....	35
10. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ АСПИРАНТАМ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ).....	35
11. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПРЕПОДАВАТЕЛЯМ ПО ОРГАНИЗАЦИИ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ).....	35

АННОТАЦИЯ

Учебная дисциплина «Термохимия биологических процессов» является важной составной частью Учебного плана подготовки аспирантов по направлению подготовки 06.06.01 Биологические науки, направленность программы: Биохимия.

Основная задача учебной дисциплины – освоение аспирантами теоретических и практических знаний в области физической химии. Дисциплина (модуль) «Термохимия биологических процессов» в системе химических наук изучает различные физико-химические методы для определения компонентов в анализируемых объектах, методики измерений, пробоподготовки, в соответствии с особенностями анализируемых объектов.

Аспиранты получают знания, применение которых на практике позволяет оценивать целесообразность и эффективность использования соответствующих методов и методик измерений, для использования в контроле качества продукции растениеводства и животноводства, продуктов питания, объектов окружающей среды, применять полученные теоретические знания при проведении научно-исследовательской работы, исследованиях в других смежных отраслях наук.

Общая трудоемкость учебной дисциплины (модуля) «Термохимия биологических процессов» составляет 6 зачетных ед., в объеме 216 часов.

Контроль знаний аспирантов проводится в форме текущей и промежуточной аттестации.

Текущая аттестация аспирантов – оценка знаний и умений проводится постоянно на практических занятиях с помощью тестовых заданий и контрольных работ, оценки самостоятельной работы аспирантов. Промежуточная аттестация аспирантов проводится в форме итогового контроля по дисциплине – дифференцированного зачета (зачета с оценкой).

Ведущие преподаватели: профессор, кандидат химических наук, доктор сельскохозяйственных наук Белопухов С.Л., доцент кандидат сельскохозяйственных наук Дмитриевская И.И., профессор кандидат химических наук Дмитриев Л.Б., кандидат химических наук, доцент Жевнеров А.В.

1. Цель и задачи дисциплины

Целью изучения дисциплины Б1.В.ДВ.01.01 «Термохимия биологических процессов» является формирование у аспирантов углубленных профессиональных знаний по современным представлениям о термохимических процессах, кинетике химических реакций в биологических системах при повышенных температурах, получение сведений о способах ускорения и замедления протекания термических процессов, оценке связи структуры химических веществ с их физико-химическими характеристиками и получении данных по термодинамическим характеристикам термических процессов.

Программа курса Термохимия биологических процессов занимает одно из ведущих мест среди фундаментальных дисциплин. Полученные аспирантами знания являются базой для последующего самостоятельного изучения химии, химической технологии, биотехнологии, почвоведения, агрохимии и экологии.

Задачи дисциплины (модуля) «Термохимия биологических процессов»:

- сформировать у аспирантов представление о термодинамике и кинетике термохимических реакций в биологических системах, влиянии строения молекул на термодинамические характеристики и скорость биохимических реакций, об основных положениях термохимии, термоаналитических методах исследования скоростей реакций, использовании расчетных методов анализа в научных исследованиях;

- о ведущих тенденциях и современных представлениях о путях развития термохимии,

- об основных научных проблемах современной термохимии,

- подготовить аспирантов к применению полученных знаний при исследовании термодинамических параметров и скоростей реакций термического разложения в биологических системах, осуществлении термоаналитических экспериментов с определением энергий активации, термодинамических параметров, порядка реакции, констант скоростей, обработке полученных результатов.

В курсе дисциплины «Термохимия биологических процессов» особое внимание уделено связи между термодинамикой и кинетикой реакций термического разложения в биологических системах, применением приобретенных знаний для использования в сельскохозяйственном производстве и технологиях переработки продукции сельского хозяйства, в

контроле качества продукции растениеводства и животноводства, продуктов питания, объектов окружающей среды.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре основной профессиональной образовательной программы высшего образования – программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре (далее программа аспирантуры).

Дисциплина (модуль) Б1.В.ДВ.01.01 «Термохимия биологических процессов» включена в перечень ФГОС ВО (уровень подготовки кадров высшей квалификации), в Блок 1 «Дисциплины (модули)» по выбору. Реализация в дисциплине «Термохимия биологических процессов» требований ФГОС ВО (уровень подготовки кадров высшей квалификации), ОПОП ВО и Учебного плана подготовки аспирантов по программе аспирантуры, решений учебно-методической комиссии и Ученого совета факультета, отечественного и зарубежного опыта, должна учитывать следующее знание научных разделов: строения химических соединений, связи строения соединений с термодинамикой и кинетикой скоростей реакций термического разложения в биологических системах, применении термоаналитических методов для оценки термодинамических и кинетических параметров, способах влияния на кинетику реакций.

Предшествующими курсами, на которых непосредственно базируется дисциплина «Термохимия биологических процессов» являются дисциплины неорганическая химия, аналитическая химия, физическая и коллоидная химия, органическая химия.

Особенностью учебной дисциплины «Термохимия биологических процессов» является ее направленность на реализацию аспирантами полученных знаний в научно-исследовательской, практической деятельности, формировании современного мировоззрения о термохимических процессах, постоянно и периодически происходящих в объектах агроферы, на основе современных знаний и законов физической химии, понимании возможностей и механизмов влияния (управления) на термодинамику и кинетику процессов (реакций), протекающих в агрофере.

Аспиранты получают знания о строении молекул химических соединений, основных понятиях и законах термохимии, применении термохимии для исследования биологических процессов, термодинамике и кинетике термохимических реакций; о современных представлениях о моделях и расчетах термодинамических и кинетических параметров термоаналитических процессов, методах исследования биологических

процессов на основе термохимии, фазовых равновесиях в гетерогенных и гомогенных биологических системах при повышенных температурах, способах смещения равновесия;

3. Общая трудоемкость дисциплины (модуля) составляет 6 зачетных единиц, 216 часов, из которых 18,35 часов составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (6 часов занятия лекционного типа, 6 – практического типа и 6 – семинарского типа, 0,35 – сдача зачета), 197,65 часов составляет самостоятельная работа аспиранта (из них 9 часов – подготовка к сдаче зачета).

4. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы аспирантуры

Дисциплина должна формировать следующие компетенции:

универсальные компетенции (УК):

- способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);

общепрофессиональные компетенции (ОПК):

- способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1).

(ПК – 1)

(ПК – 2)

(ПК – 3)

Освоение учебной дисциплины (модуля) «Термохимия биологических процессов» направлено на формирование у аспирантов компетенций, представленных в таблице 1.

Контроль знаний аспирантов проводится в форме текущей и промежуточной аттестации.

Текущая аттестация аспирантов – оценка знаний и умений проводится постоянно на практических занятиях с помощью тестовых заданий и контрольных работ, оценки самостоятельной работы аспирантов.

Промежуточная аттестация аспирантов проводится в форме итогового контроля по дисциплине – дифференцированного зачета (зачета с оценкой).

Таблица 1

Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю) «Термохимия биологических процессов», соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы аспирантуры

№ п/п	Код компетенции	Содержание формируемых компетенций	В результате изучения дисциплины (модуля) обучающиеся должны:		
			знать	уметь	владеть
1	УК-1	способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	основные понятия и законы термохимии, строения и свойства неорганических и органических соединений	воспринимать, обобщать и анализировать информацию, полученную из разных источников, по термохимическим процессам, происходящим в биологических объектах	ставить цель и организовывать её достижение, уметь пояснить свою цель и выбирать пути достижения
2	ОПК-1	способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	методики расчетов термохимических параметров молекул	рассчитывать и оценивать термохимические и кинетические параметры и характеристики, используя законы химической термодинамики и кинетики, термохимии, использовать современное программное обеспечение	систематизировать методы решения задач, описывать результаты, формулировать выводы, прогнозировать развитие ситуаций, изменение состояния параметров системы или элементов, результаты эксперимента, используя специальное программное обеспечение

5. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия

Курс предполагает наличие у аспирантов знаний и умений по основным законам химии, преподаваемым в магистратуре, в т.ч. по физической и коллоидной, органической химии.

6. Формат обучения

Обучающиеся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья обеспечиваются электронными и (или) печатными образовательными ресурсами в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья.

7. Содержание дисциплины (модуля), виды учебных занятий и формы их проведения.

7.1. Распределение трудоемкости дисциплины (модуля) по видам работ

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 6 зач.ед. (216 часов), их распределение по видам работ представлено в таблице 2.

Таблица 2

Распределение трудоемкости дисциплины по видам работ

Вид учебной работы	Трудоемкость	
	зач. ед.	час.
Общая трудоемкость дисциплины по учебному плану	6	216
Аудиторные занятия	0,52	18,35
Лекции (Л)	0,17	6
Практические занятия (ПЗ)	0,17	6
Семинары (С), в т.ч. контактная работа в период аттестации	0,18	6,35
Самостоятельная работа (СРА)	5,48	197,65
в том числе:		
самоподготовка к текущему контролю знаний		188,65
подготовка к зачету с оценкой	0,25	9
Вид контроля:		зачет с оценкой

7.2. Содержание дисциплины (модуля)

Таблица 3

Тематический план дисциплины

Наименование тем дисциплин	Всего, час.	Контактная работа, час.			Самостоятельная работа, час.
		Л	ПЗ	С	
Тема 1. Квантовая химия	27	2	2		25
Тема 2. Программы термоаналитических расчетов	27			2	25
Тема 3. Расчет термодинамических функций	27		2		25
Тема 4. Методы расчета термодинамических функций	27	2			25
Тема 5. Методы расчета энтальпии образования веществ	27		2		25
Тема 6. Методы расчета энергии разрыва связи	27			2	24
Тема 7. Квантово-химические расчеты в кинетике	27			2	24
Тема 8. Термоаналитические методы в анализе биологических систем	26,65	2			24,65
Контактная работа в период аттестации	0,35			0,35	
Итого по дисциплине (модулю)	216	6	6	6,35	197,65

Содержание дисциплины (модуля)

Лекционные занятия

Тема 1. Квантовая химия

Современная квантовая химии и ее возможности. Свойства молекул и реакций, которые можно рассчитать квантово-химическими методами (энергия и структура молекул, энергия и структура переходных состояний. Частоты колебаний, ИК и КР спектры. Атомные заряды и дипольные моменты. ЯМР свойства. Термодинамические функции газов: энтропия, теплоемкость, приведенная энергия Гиббса и изменение энтальпии. Термохимические свойства: энергии атомизации, энтальпии образования, энтальпии реакции, энергии разрыва связей, потенциалы ионизации, сродство к электрону и протону. Моделирование пути реакции: определение переходных структур и продуктов реакции, поверхности потенциальной энергии, энергий активации, константы скорости; моделирование систем в растворах и др.).

Тема 2. Программы термоаналитических расчетов

Комплекс программ Gaussian. Визуализация результатов расчета с помощью программы GausView. Квантовохимические расчеты. Описание геометрии молекул различной симметрии с помощью Z-матриц. Использование мнимых атомов при описании линейной цепочки атомов и геометрии циклических соединений. Задание геометрии молекулы через координаты атомов, полученные с помощью программы GausView. Нахождение стационарных точек на поверхности потенциальной энергии. Расчет частот колебаний для определения характера стационарных точек, найденных при оптимизации геометрии.

Тема 3. Расчет термодинамических функций

Термодинамические функции (энтропия, теплоемкость, изменение энтальпии и приведенной энергии Гиббса) газообразных соединений методом статистической термодинамики. Приближение «жесткий ротатор – гармонический осциллятор». Использование экспериментальных молекулярных постоянных для расчета термодинамических функций. Сравнение экспериментальных и рассчитанных значений энтропии и теплоемкости. Применение при расчете термодинамических функций молекулярных постоянных, рассчитанных квантово-химическими методами. Примеры расчетов термодинамических функций, сравнение с экспериментом. Значения энтропии, теплоемкости и изменения энтальпии, получаемые из выходного (OUTPUT) файла программы Gaussian. Параметры INPUT файла,

позволяющие рассчитать значения термодинамических функций при различных температурах, а также использовать заданный масштабирующий множитель для частот колебаний. Коррекция значений энтропии для молекул с оптической изомерией. Выбор квантово-химического метода и набора базисных функций для расчета термодинамических функций.

Тема 4. Методы расчета термодинамических функций

Приближенный метод расчета термодинамических функций веществ с элементами статистического расчета. Расчет равновесных смесей изомеров или конформеров через их мольные доли и термодинамические функции отдельных конформеров с введением для энтропии и энергии Гиббса поправок на смешение (метод Питцера-Астона). Расчет равновесного состава конформеров на основе рассчитанных значений относительных энергий и энтропий. Приближенный учет энтропийного фактора при расчете равновесного состава. Расчет константы равновесия через изменение энергии Гиббса и через статистические суммы по состояниям. Анализ термохимической части OUTPUT файла программы Gaussian.

Тема 5. Методы расчета энтальпии образования веществ

Методы расчета энтальпии образования газообразного вещества на основе энергии атомизации. Основные соотношения. Энтальпия образования вещества из элементов в стандартных состояниях, при 0 К и при 298 К. Величины, определяемые из теоретического расчета: энергии атомов, энергия молекулы, поправка на колебания при 0 К (zero point energy correction) и термическая поправка. Расчет энергии атомов. Использование экспериментальных величин энтальпии образования атомов при 0 К и термических поправок для элементов в их стандартных состояниях. Точность различных квантово-химических методов при расчете энтальпий образования. Расчеты энтальпий образования небольших молекул. Аппроксимационные методы для точных расчетов энтальпии образования (Weizmann theory, Complete Basis Set theory, Gaussian theory). Методы семейства Gaussian-*n* (G1, G2, G3, G3X, G4). Основная идея методов и их тестирование на экспериментальных значениях энтальпий образования и других термохимических величинах. Сравнение результатов расчета энтальпий образования методом G4 с экспериментальными данными. Учет конформационного состава при расчете энтальпий образования. Расчет энтальпий образования методом изодесмических (*isodesmic*) реакций. Основные уравнения метода. Реакции разделения связей (*bond separation reactions*) и гомодесмотические (*homodesmotic*) реакции. Выбор

квантовохимического метода для проведения расчетов энтальпии образования методом изодесмических реакций. Использование теории среднего уровня для больших молекул. Сравнение результатов, полученных методом реакций атомизации и методом изодесмических реакций. Источники надежных экспериментальных данных по энтальпиям образования (справочники и базы данных).

Тема 6. Методы расчета энергии разрыва связи

Методы расчета энергии разрыва связи из энтальпии образования молекулы и энтальпий образования радикалов, образующихся при разрыве данной связи. Особенности расчета молекул с открытой электронной оболочкой. Методы, разработанные для расчета энтальпий образования радикалов. Расчет энергий ионизации, сродства к электрону и протону. Расчет энтальпий образования ионов. Оценка энтальпий испарения и сублимации на основе расчета энтальпий образования газообразных соединений.

Тема 7. Квантово-химические расчеты в кинетике

Поверхность потенциальной энергии, термодинамика и кинетика. Энергия активации и константа скорости реакции. Исследование поверхности потенциальной энергии. Способы нахождения переходных состояний. Расчет пути реакции: использование ключевого слова IRC (Intrinsic Reaction Coordinate method). Расчет константы скорости реакции через изменение энергии Гиббса и через статистические суммы по состояниям.

Тема 8. Термоаналитические методы в анализе биологических систем

Приборы для проведения термоаналитических исследований. Точность метода. Чувствительность. Область применения. Термоаналитический комплекс на базе дериватографа. Программа расчета термограмм. Расчет энтальпий образования, энергий активации, химического состава биологических систем. Применение в исследовании объектов окружающей среды, биологических объектов.

Таблица 4

Содержание семинарских занятий по дисциплине и контрольных мероприятий

№ п/п	Наименование разделов и тем дисциплины (укрупнено)	№ и название семинарских занятий	Вид контрольного мероприятия	Кол-во часов
1.	Тема 1. Квантовая химия	Свойства молекул и реакций, которые можно рассчитать квантово-химическими методами (энергия и структура молекул, энергия и структура переходных состояний. Частоты колебаний, ИК и КР спектры.	Опрос	2
2.	Тема 2. Программы термоаналитических расчетов	Комплекс программ Gaussian. Визуализация результатов расчета с помощью программы GausView.	Опрос	2
3.	Тема 3. Расчет термодинамических функций	Термодинамические функции (энтропия, теплоемкость, изменение энтальпии и приведенной энергии Гиббса) газообразных соединений методом статистической термодинамики.	Тестирование	2
4.	Тема 5. Методы расчета энтальпии образования веществ	Методы расчета энтальпии образования газообразного вещества на основе энергии атомизации. Основные соотношения. Энтальпия образования вещества из элементов в стандартных состояниях	Тестирование	2
5.	Тема 6. Методы расчета энергии разрыва связи	Методы расчета энергии разрыва связи из энтальпии образования молекулы и энтальпий образования радикалов, образующихся при разрыве данной связи. Особенности расчета молекул с открытой электронной оболочкой.	Тестирование	2
6.	Тема 7. Квантово-химические расчеты в кинетике	Поверхность потенциальной энергии, термодинамика и кинетика. Энергия активации и константа скорости реакции.	Тестирование	2
7.	Контактная работа в период аттестации			0,35
	Итого по дисциплине			12,35

7.3. Образовательные технологии

Таблица 5

Активные и интерактивные формы проведения занятий

№ п/п	Тема и форма занятия		Наименование используемых активных и интерактивных образовательных технологий	Кол-во часов
1.	Квантовая химия	ПЗ	Применение программы Simulink и ChemLab для оценки квантово-химических параметров веществ	2
2.	Расчет термодинамических функций	ПЗ	Применение программы Simulink пакета MathLab для расчета термодинамических функций. Мастер-класс специалистов-программистов.	2
3	Методы расчета термодинамических функций	Лекция	Применение компьютерного моделирования для оценки энергии активации термохимических процессов	2
Всего				6

Общее количество часов аудиторных занятий, проведённых с применением активных и интерактивных образовательных технологий составляет 6 часа (33% от общей аудиторной трудоемкости дисциплины).

7.4. Перечень вопросов для самостоятельного изучения дисциплины (модуля) «Термохимия биологических процессов»

Таблица 6

Перечень вопросов для самостоятельного изучения дисциплины

№ п/п	№ раздела и темы	Перечень рассматриваемых вопросов для самостоятельного изучения	Кол-во часов
1.	Тема 1. Квантовая химия	Атомные заряды и дипольные моменты. ЯМР свойства. Термодинамические функции газов: энтропия, теплоемкость, приведенная энергия Гиббса и изменение энтальпии. Термохимические свойства: энергии атомизации, энтальпии образования, энтальпии реакции, энергии разрыва связей, потенциалы ионизации, сродство к электрону и протону. Моделирование пути реакции: определение переходных структур и продуктов реакции, поверхности потенциальной энергии, энергий активации, константы скорости; моделирование систем в растворах и др.).	23
2	Тема 2. Программы термоаналитических расчетов	Описание геометрии молекул различной симметрии с помощью Z-матриц. Использование мнимых атомов при описании линейной цепочки атомов и геометрии циклических соединений. Задание геометрии молекулы через координаты атомов, полученные с помощью программы GausView. Нахождение стационарных точек на поверхности потенциальной энергии. Расчет частот	23

№ п/п	№ раздела и темы	Перечень рассматриваемых вопросов для самостоятельного изучения	Кол-во часов
		колебаний для определения характера стационарных точек, найденных при оптимизации геометрии.	
3.	Тема 3 Расчет термодинамических функций	Использование экспериментальных молекулярных постоянных для расчета термодинамических функций. Сравнение экспериментальных и рассчитанных значений энтропии и теплоемкости. Применение при расчете термодинамических функций молекулярных постоянных, рассчитанных квантово-химическими методами. Примеры расчетов термодинамических функций, сравнение с экспериментом. Значения энтропии, теплоемкости и изменения энтальпии, получаемые из выходного (OUTPUT) файла программы Gaussian. Параметры INPUT файла, позволяющие рассчитать значения термодинамических функций при различных температурах, а также использовать заданный масштабирующий множитель для частот колебаний. Коррекция значений энтропии для молекул с оптической изомерией. Выбор квантово-химического метода и набора базисных функций для расчета термодинамических функций.	23
4.	Тема 4. Методы расчета термодинамических функций	Расчет равновесного состава конформеров на основе рассчитанных значений относительных энергий и энтропий. Приближенный учет энтропийного фактора при расчете равновесного состава. Расчет константы равновесия через изменение энергии Гиббса и через статистические суммы по состояниям. Анализ термохимической части OUTPUT файла программы Gaussian.	23
5.	Тема 5. Методы расчета энтальпии образования веществ	Расчет энергии атомов. Использование экспериментальных величин энтальпии образования атомов при 0 К и термических поправок для элементов в их стандартных состояниях. Точность различных квантово-химических методов при расчете энтальпий образования. Расчеты энтальпий образования небольших молекул. Аппроксимационные методы для точных расчетов энтальпии образования (Weizmann theory, Complete Basis Set theory, Gaussian theory). Методы семейства Gaussian- <i>n</i> (G1, G2, G3, G3X, G4). Основная идея методов и их тестирование на экспериментальных значениях энтальпий образования и других термохимических величинах. Сравнение результатов расчета энтальпий образования методом G4 с экспериментальными данными. Учет конформационного состава при расчете энтальпий образования. Расчет энтальпий образования методом изодесмических (<i>isodesmic</i>) реакций. Основные уравнения метода. Реакции разделения связей (<i>bond separation reactions</i>) и гомодесмотические (<i>homodesmotic</i>) реакции. Выбор квантовохимического метода для проведения расчетов энтальпии образования методом изодесмических	23

№ п/п	№ раздела и темы	Перечень рассматриваемых вопросов для самостоятельного изучения	Кол-во часов
		реакций. Использование теории среднего уровня для больших молекул. Сравнение результатов, полученных методом реакций атомизации и методом изодесмических реакций.	
6.	Тема 6. Методы расчета энергии разрыва связи	Методы, разработанные для расчета энтальпий образования радикалов. Расчет энергий ионизации, сродства к электрону и протону. Расчет энтальпий образования ионов. Оценка энтальпий испарения и сублимации на основе расчета энтальпий образования газообразных соединений.	23
7.	Тема 7. Квантово-химические расчеты в кинетике	Расчет пути реакции: использование ключевого слова IRC (Intrinsic Reaction Coordinate method). Расчет константы скорости реакции через изменение энергии Гиббса и через статистические суммы по состояниям.	23
8.	Тема 8. Термоаналитические методы в анализе биологических систем	Программа расчета термограмм. Расчет энтальпий образования, энергий активации, химического состава биологических систем. Применение в исследовании объектов окружающей среды, биологических объектов.	36,65
ВСЕГО			197,65

7.5. Контрольные работы

Пример контрольной работы (теста):

1. Укажите правильную формулировку закона Гесса:

- тепловой эффект химической реакции, проводимой при $V=\text{const}$, или $P=\text{const}$, зависит от вида и состояния исходных веществ и конечных продуктов, но не зависит от пути проведения реакции;
- тепловой эффект химической реакции зависит только от начального и конечного состояний вещества, но не зависит от пути проведения реакции;
- тепловой эффект химической реакции зависит от вида и состояния исходных веществ и конечных продуктов;
- тепловой эффект химической реакции зависит от агрегатных состояний, в которых находятся исходные и конечные продукты.

2. Какие условия приняты в термохимии за стандартное состояние?

- состояние чистого вещества при $P = 1$ атм.;
- состояние чистого вещества при $P = 1$ атм и $t = 25^{\circ} \text{C}$ в соответствующем для данных условий агрегатном состоянии;
- состояние чистого вещества при $t = 25^{\circ} \text{C}$;
- Состояние чистого вещества при $P = 1$ атм и $t = 25^{\circ} \text{C}$, находящегося в виде пара.

3. Чему равен тепловой эффект химической реакции при $P = \text{const}$?

а) $Q_p = R \cdot \ln V_2/V_1$

б) $Q_p = \Delta U + P\Delta V - T\Delta S$

в) $Q_p = RT/nF \cdot \lg a$

г) $Q_p = \Delta H$

4. Какие реакции пригодны для термохимических измерений?

а) реакции, дающие продукты неопределенного состава;

б) реакции, идущие медленно;

в) *реакции, которые проходят быстро и до конца и образуют продукты вполне определенного состава;*

г) реакции, протекающие обратимо.

5. Чему равен тепловой эффект реакции при $V = \text{const}$?

а) $Q_v = dU + P\Delta V$

б) $Q_v = dU + \delta A$

в) $Q_v = \Delta U$

г) $Q_v = dU + \Delta nRT$

6. До каких пор может протекать самопроизвольный процесс в изолированной системе?

а) пока система не достигнет стандартного состояния;

б) *пока энтропия системы не достигнет максимального для данных условий значения;*

в) пока внутренняя энергия не достигнет максимального для данных условий значения;

г) в изолированной системе самопроизвольный процесс вообще не может протекать.

7. Почему Q_v химических реакций не зависит от пути проведения реакций, а только от состояния начальных веществ и конечных реакций?

а) потому что Q_v измеряется при условии $V = \text{const}$;

б) потому что в ходе химической реакции, проводимой при $V = \text{const}$, не совершается работы расширения газа;

в) *потому что Q_v представляет собой изменение внутренней энергии вещества в ходе химической реакции, проводимой при $V = \text{const}$, а запас внутренней энергии определяется только состоянием вещества;*

г) потому что химические реакции, проводимые при $V = \text{const}$, всегда являются самопроизвольными.

8. Укажите правильное определение стандартной энтальпии химической реакции:

а) стандартная энтальпия химической реакции представляет собой разность между стандартными энтальпиями образования продуктов реакции и исходных веществ;

б) это разность между стандартными энтальпиями образования исходных веществ и продуктов реакции;

в) стандартная энтальпия химической реакции представляет собой сумму стандартных энтальпий сгорания исходных и конечных веществ;

г) стандартная энтальпия химической реакции представляет собой изменение внутренней энергии исходных веществ в ходе реакции.

9. Какие реакции пригодны для термохимических измерений?

а) реакции, идущие медленно;

б) реакции, которые проходят быстро и до конца, и образующие продукты вполне определенного состава;

в) реакции, дающие продукты неопределенного состава;

г) реакции, протекающие обратимо.

10. Укажите правильное соотношение между Q_p и Q_v химических реакций, рассчитанных на изменение количества вещества, равное 1 моль.

а) $Q_p = Q_v + \Delta nRT$

б) $Q_p + Q_v = RT$

в) $Q_p = Q_v + RT$

г) $Q_v = Q_p + \Delta nRT$

11. Чему равен тепловой эффект химической реакции при $P = \text{const}$?

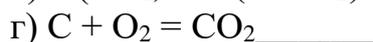
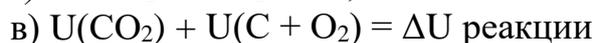
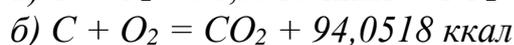
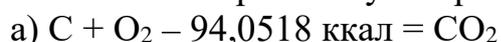
а) $Q_p = R \ln(V_1/V_2)$

б) $Q_p = \Delta U + P \cdot \Delta V - T \cdot \Delta S$

в) $Q_p = \Delta H$

г) $Q_p = (RT/nF) \cdot \lg a$

12. Укажите правильную термохимическую запись химической реакции:



13. До каких пор может протекать самопроизвольный процесс в изолированной системе?

а) пока система не достигнет стандартного состояния;

б) в изолированной системе самопроизвольный процесс вообще не может протекать;

в) пока внутренняя энергия системы не достигнет максимального, для данных условий значения;

г) пока энтропия системы не достигнет максимального, для данного состояния значения.

14. Что изучает термохимия?

а) процессы, в которых электрическая энергия превращается в тепловую;

б) тепловые эффекты, которыми сопровождаются химические реакции;

в) процессы, в которых изменяется агрегатное состояние вещества;

г) процессы, протекающие на границе раздела двух фаз.

15. Какие процессы называются самопроизвольными?

а) всякий процесс, протекающий обратимо;

б) процессы, протекающие при воздействии на них теплоты;

в) процессы, протекающие сами по себе без внешних воздействий;

г) процессы, которые требуют для своего проведения затрат какого-либо вида энергии.

16. Вычислить стандартную энтропию плавления льда. $\Delta H^0_{пл.} = 6,0$ кДж/К•моль

а) $2,2 \cdot 10^{-2}$ кДж/моль.К

б) $2,4 \cdot 10^{-2}$ кДж/моль. К

в) $5,0 \cdot 10^{-2}$ кДж/моль.К

г) $1,89 \cdot 10^{-2}$ кДж/моль.К

17. Рассчитать калорийность сахарозы по уравнению её сгорания:

$C_{12}H_{22}O_{11} + 12O_2 = 12CO_2 + 11H_2O$; $\Delta H^0(C_{12}H_{22}O_{11}) = - 4824,0$ кДж/моль;

$\Delta H^0(CO_2) = - 393,51$ кДж/моль; $\Delta H^0(H_2O) = - 241,82$ кДж/моль

а) $- 2679,23$ кДж/моль

б) $- 2558,14$ кДж/моль

в) $- 3694,02$ кДж/моль

г) $- 2798,31$ кДж/моль

18. Укажите правильное определение стандартной энтальпии химической реакции:

а) сумма стандартных энтальпий сгорания исходных и конечных веществ есть стандартная энтальпия химической реакции;

б) изменение внутренней энергии исходных веществ в ходе реакции – стандартная энтальпия химической реакции;

в) стандартная энтальпия химической реакции представляет собой разность между стандартными энтальпиями образования продуктов реакции и исходных веществ;

г) разность между стандартными энтальпиями образования исходных веществ и продуктов реакции есть стандартная энтальпия химической реакции.

19. При сгорании пропионовой кислоты в калориметре выделяется 3260,4 Дж/грамм. Чему равно ΔH при сгорании 1 моля пропионовой кислоты?

- а) 254,3 кДж/моль
- б) 346,98 кДж/моль
- в) 468,12 кДж/моль
- г) 312,65 кДж/моль

20. Рассчитать тепловой эффект реакции $2\text{SO}_2 + \text{O}_2 = 2\text{SO}_3$, если $\Delta H^0(\text{SO}_2) = -395,2$ кДж/моль; $\Delta H^0(\text{SO}_3) = -296,9$ кДж/моль

- а) 201,36 кДж/моль
- б) 196,6 кДж/моль
- в) 179,3 кДж/моль
- г) 169,58 кДж/моль

21. Рассчитать стандартную энтальпию реакции $6\text{C}(\text{г}) + 6\text{H}(\text{г}) = \text{C}_6\text{H}_6 = 19,8$ ккал.моль⁻¹, $\Delta H^0(\text{C}(\text{г})) = 171,7$ ккал.моль⁻¹, $\Delta H^0(\text{H}(\text{г})) = 52,1$ ккал.моль⁻¹.

- а) – 2007,7 ккал.моль⁻¹
- б) – 1507,0 ккал.моль⁻¹
- в) – 1013,0 ккал.моль⁻¹
- г) – 1323,0 ккал.моль⁻¹

22. Рассчитать изменение энтропии при испарении 1 моль воды, если удельная теплота кипения равна 2,3 кДж/грамм.

- а) 0,16 кДж/моль
- б) 0,11 кДж/моль
- в) 0,18 кДж/моль
- г) 0,12 кДж/моль

23. Рассчитать стандартную энтальпию реакции $\text{CaO} + \text{H}_2\text{O} = \text{Ca}(\text{OH})_2$, если $\Delta H^0(\text{CaO}) = -635,5$ кДж/моль, $\Delta H^0\text{Ca}(\text{OH})_2 = -986,2$ кДж/моль, $\Delta H^0(\text{H}_2\text{O}) = -241,82$ кДж/моль.

- а) – 108,88 кДж/моль
- б) – 126,33 кДж/моль
- в) – 113,65 кДж/моль
- г) – 101,01 кДж/моль

24. До каких пор может протекать самопроизвольный процесс в изолированной системе?

а) пока внутренняя энергия системы не достигнет максимального для данных условий, значения;

б) в изолированной системе самопроизвольный процесс вообще не может протекать;

в) пока система не достигнет стандартного состояния;

г) пока энтропия системы не достигнет максимального для данных условий значения.

25. Термохимическое уравнение реакции горения фосфора $4P + 5O_2 = 2P_2O_5 + 720$ ккал. Сколько теплоты выделяется при сгорании 100 г фосфора?

а) 624 ккал

б) 463 ккал.

в) 581 ккал.

г) 694 ккал.

26. Чему равна энтропия плавления льда, если удельная теплота плавления льда равна 79,8 кал/грамм?

а) 5,26 кал/моль.град.

б) 5,20 кал/моль.град.

в) 7,07 кал/моль.град.

г) 13 кал/моль.град.

27. Почему Q_v химической реакции не зависит от пути проведения реакции, а только от состояния начальных веществ и конечных продуктов реакции?

а) потому что Q_v измеряется при условии $V = \text{const}$;

б) потому что Q_v представляет собой изменение внутренней энергии вещества в ходе химической реакции при $V = \text{const}$, а запас внутренней энергии определяется только состоянием вещества;

в) потому что в ходе химической реакции, проводимой при $V = \text{const}$, не совершается работа расширения газа;

г) потому что химические реакции, проводимые при $V = \text{const}$, всегда являются самопроизвольными.

28. Найдите стандартную энтальпию реакции $CO + Cl_2 = COCl_2$ если $\Delta H^0(CO) = -110,53$ кДж/моль, $\Delta H^0(COCl) = -482,00$ кДж/моль.

а) -429 кДж

б) $-295,47$ кДж

в) -129 кДж

г) – 371,47 кДж

29. Найдите изменение энтропии в реакции $2\text{C}_2\text{H}_2 + 5\text{O}_2 = 4\text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$, если $S^0(\text{H}_2\text{O}) = 188,78$ Дж/моль.К, $S^0(\text{CO}_2) = -213,65$ Дж/моль.К, $S^0(\text{C}_2\text{H}_2) = 200,8$ Дж/моль.К, $S^0(\text{O}_2) = 205,18$ Дж/моль.К.

а) – 2150,3 Дж/моль

б) – 1995,5 Дж/моль

в) – 1904,5 Дж/моль

г) – 1869,5 Дж/моль

30. При сгорании масляной кислоты в калориметре выделяется 690 ккал/грамм. Рассчитать ΔH при сгорании 1 моля щавелевой кислоты при $t = 25^\circ\text{C}$:

а) 60,57 ккал.моль⁻¹

б) 61,16 ккал.моль⁻¹

в) 59,98 ккал.моль⁻¹

г) 60,72 ккал.моль⁻¹

31. Укажите правильное соотношение между Q_p и Q_v химических реакций, рассчитанных на изменение количества вещества, равное 1 моль:

а) $Q_p = Q_v + \Delta n \cdot RT$

б) $Q_p = Q_v + RT$

в) $Q_p + Q_v = RT$

г) $Q_v = Q_p + \Delta n \cdot RT$

32. При сжигании 6,08 г магния выделилось 36,52 ккал. Составить термохимическое уравнение образования окиси магния.

а) 292,16 ккал

б) 268,16 ккал

в) 391,15 ккал

г) 425,16 ккал

33. Найти изменение энтропии в реакции $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 = \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$ при стандартных условиях, если $S^0(\text{H}_2\text{O}) = 188,78$ Дж/моль.К, $S^0(\text{CO}_2) = 213,65$ Дж/моль.К, $S^0(\text{CH}_4) = 219,4$ Дж/моль.К, $S^0(\text{O}_2) = 205,18$ Дж/моль.К.

а) – 46,55 Дж/моль.К

б) – 38,55 Дж/моль.К

в) – 15,69 Дж/моль.К

г) – 55,69 Дж/моль.К

34. Укажите правильное определение стандартной энтальпии сгорания:

а) стандартная энтальпия сгорания органического вещества представляет собой стандартную энтальпию реакции полного окисления 1 моля вещества до $\text{CO}_2(\text{г})$ и $\text{H}_2\text{O}(\text{ж})$;

б) стандартная энтальпия сгорания органического вещества представляет собой теплоту окисления вещества;

40. Рассчитать изменение энтропии при испарении 1 моль воды, если теплота кипения ($\Delta H_{\text{кип}}$) равна 2,257 кДж/моль

- а) 6,05 Дж/моль.К
- б) 16,10 Дж/моль.К
- в) 2,03 Дж/моль.К
- г) 3,36 Дж/моль.К

41. Найти стандартную энтальпию реакции $\text{CaO} + \text{H}_2\text{O} = \text{Ca(OH)}_2$. если $\Delta H^0(\text{Ca(OH)}_2) = -986,2$ кДж/моль, $\Delta H^0(\text{H}_2\text{O}) = -241,82$ кДж/моль, $\Delta H^0(\text{CaO}) = -635,5$ кДж/моль.

- а) – 113,25 кДж/моль
- б) – 125,31 кДж/моль
- в) – 154,88 кДж/моль
- г) – 108,88 кДж/моль

42. Вычислить сколько тепла выделяется при получении 300 г метафосфорной кислоты из фосфорного ангидрида. Если $\Delta H^0(\text{P}_2\text{O}_5) = 370$ ккал/моль, $\Delta H^0(\text{HPO}_3) = 226,2$ ккал/моль, $\Delta H^0(\text{H}_2\text{O}) = 68,4$ ккал/моль.

- а) 27,5 ккал
- б) 26,3 ккал
- в) 21,36 ккал
- г) 39,8 ккал

43. При сжигании серы получено 32 г двуокиси серы. При этом выделилось 35 ккал. Составить термохимическое уравнение этой реакции.

- а) 70 ккал
- б) 80 ккал
- в) 60 ккал
- г) 50 ккал

44. Вычислить стандартную энтропию плавления льда. Если ΔH^0 плавления = 6,0 дж/моль.

- а) $3,26 \cdot 10^{-2}$ кДж/моль.К
- б) $2,29 \cdot 10^{-2}$ кДж/моль.К
- в) $2,2 \cdot 10^{-2}$ кДж/моль.К
- г) $4,22 \cdot 10^{-2}$ кДж/моль.К

45. В каком направлении (прямом или обратном) пойдет химическая реакция, если изменение свободной энергии Гиббса (ΔG) для данной реакции равна нулю?

- а) реакция достигла состояния равновесия
- б) реакция пойдет в сторону образования продуктов
- в) реакция пойдет в сторону образования исходных продуктов
- г) реакция вообще не идет в данной ситуации

46. Рассчитать изменение энтропии при испарении 1 моль воды, если удельная теплота кипения равна 2,5 кДж/грамм.

- а) 130 Дж/моль.К
- б) 140 Дж/моль.К
- в) 110 Дж/моль.К
- г) 120 Дж/моль.К

47. Рассчитать калорийность сахарозы, по уравнению: $C_{12}H_{22}O_{11} + 12O_2 = 12CO_2 + 11H_2O$, если $\Delta H^0(C_{12}H_{22}O_{11}) = - 4824,0$ кДж/моль, $\Delta H^0(CO_2) = - 393,51$ кДж/моль $\Delta H^0(H_2O) = - 241,82$ кДж/моль.

- а) -2665,14 кДж/моль
- б) -1326,25 кДж/моль
- в) - 2558,14 кДж/моль
- г) - 3100,14 кДж/моль

48. Какие процессы называются самопроизвольными?

- а) процессы, протекающие при воздействии на них теплоты;
- б) всякий процесс, протекающий обратимо;
- в) процессы, протекающие сами по себе, без внешних воздействий;
- г) все процессы, которые требуют для своего проведения затрат какого-либо вида энергии

49. При сжигании в калориметрической бомбе 1.753 г сахарозы температура повышается на 2,907°. ΔH сгорания сахарозы равно 1349,7 ккал/моль.

- а) 2,38 ккал/град
- б) 4,62 ккал/град
- в) 2,87 ккал/град
- г) 4,12 ккал/град

50. Вычислить изменение стандартной энтропии образования аммиака, если $N_2 + 3H_2 = 2NH_3$.

$\Delta S^0(NH_3)=193$ Дж/моль.К, $\Delta S^0(H_2)=131$ Дж/моль.К, $\Delta S^0(N_2) = 192$ Дж/моль.К.

- а) -186 Дж/моль.К
- б) - 199 Дж/моль.К
- в) - 179 Дж/моль.К
- г) -201 Дж/моль.К

51. Почему Q_v химической реакции не зависит от пути проведения реакции. А только от состояния начальных веществ и конечных продуктов реакции?

- а) потому что Q_v измеряется при условии $V = const$;
- б) потому что в ходе химической реакции, проводимой при $V = const$, не совершается работа расширения газа;

в) потому что Q_v представляет собой изменение внутренней энергии вещества в ходе химической реакции при $V = \text{const}$, а запас внутренней энергии определяется только состоянием вещества;

г) потому что химические реакции. Проводимые при $V = \text{const}$. всегда являются самопроизвольными

52. Рассчитать тепловой эффект реакции $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2\text{O} = \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, если $\Delta H^0(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}) = - 66,35$ ккал/моль, $\Delta H^0(\text{H}_2\text{O}(\text{ж})) = - 68,32$ ккал/моль $\Delta H^0(\text{C}_2\text{H}_4) = + 12,5$ ккал/моль.

а) – 10,55 ккал/моль

б) –11,55 ккал/моль

в) –12,55 ккал/моль

г) –9,55 ккал/моль

53. Рассчитать энтропию обратимого превращения 1 моль воды в пар при температуре кипения. Если теплота испарения 1 грамм воды 534 кал.

а) 36 кал/К•моль

б) 16 кал/К•моль

в) 46 кал/К•моль

г) 26 кал/К•моль

54. Рассчитать стандартную энтальпию образования ацетилена, если $\text{C}_2\text{H}_2(\text{г}) + 2\frac{1}{2}\text{O}_2(\text{г}) \rightarrow 2\text{CO}_2(\text{г}) + \text{H}_2\text{O}(\text{ж}) - 1300$ кДж, если $\Delta H^0(\text{H}_2\text{O}) = - 286$ кДж/моль, $\Delta H^0(\text{CO}_2) = - 394$ кДж/моль

а) + 326 кДж/моль

б) + 226 кДж/моль

в) + 426 кДж/моль

г) + 126 кДж/моль

8. Форма промежуточной аттестации и фонд оценочных средств, включающий:

- Перечень компетенций выпускников образовательной программы, в формировании которых участвует дисциплина (модуль).

- Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения

Примерный перечень вопросов к зачету по дисциплине:

1. Какие объекты изучает термохимия.

2. Какие термодинамические и кинетические параметры могут быть получены с применением термоаналитических исследований.

3. Что изучает квантовая химия.

4. Современная квантовая химии и ее возможности.

5. Какие свойства молекул и реакций можно рассчитать квантово-химическими методами.
6. Энергия и структура молекул, энергия и структура переходных состояний.
7. Частоты колебаний, ИК и КР спектры.
8. Атомные заряды и дипольные моменты. ЯМР свойства.
9. Термодинамические функции газов: энтропия, теплоемкость, приведенная энергия Гиббса и изменение энтальпии.
10. Термохимические свойства: энергии атомизации, энтальпии образования, энтальпии реакции, энергии разрыва связей, потенциалы ионизации, сродство к электрону и протону.
11. Моделирование пути реакции: определение переходных структур и продуктов реакции, поверхности потенциальной энергии, энергий активации, константы скорости; моделирование систем в растворах и др.).
12. Какие программы термоаналитических расчетов существуют в настоящее время.
13. Применение комплекс программ Gaussian для термоаналитических расчетов.
14. Нахождение стационарных точек на поверхности потенциальной энергии.
15. Расчет частот колебаний для определения характера стационарных точек, найденных при оптимизации геометрии.
16. Расчет термодинамических функций (энтропия, теплоемкость, изменение энтальпии и приведенной энергии Гиббса) газообразных соединений методом статистической термодинамики.
17. Приближение «жесткий ротатор – гармонический осциллятор».
18. Сравнение экспериментальных и рассчитанных значений энтропии и теплоемкости.
19. Примеры расчетов термодинамических функций, сравнение с экспериментом.
20. Значения энтропии, теплоемкости и изменения энтальпии, получаемые из программы Gaussian.
21. Методы расчета термодинамических функций.
22. Приближенный метод расчета термодинамических функций веществ с элементами статистического расчета.
23. Расчет константы равновесия через изменение энергии Гиббса и через статистические суммы по состояниям.
24. Анализ термохимической части OUTPUT файла программы Gaussian.

25. Методы расчета энтальпии образования веществ.
26. Методы расчета энтальпии образования газообразного вещества на основе энергии атомизации.
27. Величины, определяемые из теоретического расчета: энергии атомов, энергия молекулы.
28. Расчет энергии атомов.
29. Использование экспериментальных величин энтальпии образования атомов при 0 К и термических поправок для элементов в их стандартных состояниях.
30. Точность различных квантово-химических методов при расчете энтальпий образования.
31. Расчеты энтальпий образования небольших молекул.
32. Аппроксимационные методы для точных расчетов энтальпии образования.
33. Сравнение результатов, полученных методом реакций атомизации и методом изодесмических реакций.
34. Методы расчета энергии разрыва связи из энтальпии образования молекулы и энтальпий образования радикалов, образующихся при разрыве данной связи.
35. Расчет энергий ионизации, сродства к электрону и протону.
36. Расчет энтальпий образования ионов.
37. Оценка энтальпий испарения и сублимации на основе расчета энтальпий образования газообразных соединений.
38. Поверхность потенциальной энергии, термодинамика и кинетика.
39. Энергия активации и константа скорости реакции.
40. Исследование поверхности потенциальной энергии.
41. Расчет константы скорости реакции через изменение энергии Гиббса и через статистические суммы по состояниям.
42. Приборы для проведения термоаналитических исследований.
43. Термоаналитический комплекс на базе дериватографа.
44. Программа расчета термограмм. Расчет энтальпий образования, энергий активации, химического состава биологических систем.
45. Применение термохимии в исследовании объектов окружающей среды, биологических объектов.

Формы промежуточной аттестации по дисциплине (модулю): дифференцированный зачет (зачет с оценкой).

9. Ресурсное обеспечение:

9.1 Перечень основной литературы

1. Мюнстер А. Химическая термодинамика. Пер. с нем. Изд.3. 2010. М.: Издательская группа URSS. 296 с
2. Березин М.Б. // Berezin M.B. Термохимия сольватации хлорофилла и родственных соединений // Thermochemistry of solvation of chlorophyll and related compounds. (In Russian)/ 2008. М.: Издательская группа URSS/ 256 с.
3. Воскресенская О.О., Скорик Н.А. Термодинамические и кинетические аспекты образования и редокс-распада комплексов церия(IV) с рядом гидроксилсодержащих органических лигандов/ 2011. М.: Издательская группа URSS. 220 с.
4. Попков В.А., Ершов Ю.А., Берлянд А.С. Общая химия. биофизическая химия. химия биогенных элементов. 10-е изд., пер. и доп. Учебник для вузов. М.: Изд-во Юрайт, 2015. 562 с.
5. Ермаков А.И. Квантовая механика и квантовая химия. Учебник и практикум для академического бакалавриата . М.: Изд-во Юрайт, 2015. 555 с.

9.2 Перечень дополнительной литературы

1. Белопухов С.Л., Шнее Т.В., Старых С.Э. и др. Лабораторный практикум по физической и коллоидной химии. М.: Изд-во МСХА имени К.А. Тимирязева, 2012, 300 с.
2. Глазко В.И., Белопухов С.Л., Сторчевой В.Ф. Нанотехнологии и материалы в сельском хозяйстве. М.: Изд-во ФГБОУ ВО РГАУ-МСХА имени К.А.Тимирязева, 2015.- 257 с.
3. Белопухов С.Л., Дмитриевская И.И., Антошин В.А. и др. Методы анализа серы при контроле качества продукции растениеводства. М.: Изд-во РГАУ-МСХА имени К.А. Тимирязева, 2015.- 189 с.

9.3 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

- [Scifinder](#) - поиск методик синтеза, литературный и патентный поиск по химии,
- [SPRESIweb](#) - литературный и патентный поиск, поиск по части молекулы и т.п.
- [eMolecules](#) - поиск соединений в комбинаторных базах данных,
- [ChemExper](#) - поиск соединений в различных базах данных,
- [SyntheticPages](#) - Интерактивная база данных химических методик,
- [ISI's Reaction Citation Index \(RCI\)](#) – база данных по химическим реакциям,

- Elibrary.ru - доступ к аннотациям статей в 30 тыс. журналах, полнотекстовый поиск,
- Six NMR spectral and physical property databases from Advanced Chemistry Development (ACD) – данные по физико-химическим свойствам соединений,
- Cambridge Crystallographic Data Centre – поисковая система по свойствам веществ в базе Cambridge Structural Database,
- ChemSource – Интернет – ресурс по разделам химии,
- NIST Chemistry WebBook – данные по термодинамическим свойствам, энтальпии образования, энтропии более 15 000 химических соединений
- The WWW chemical structures database - содержит более чем 2250 структур, ссылки на оригинальные страницы Сети. Структурный и субструктурный поиск, поиск по формуле, по названию и др.
- БАЗА ДАННЫХ "ХИМИЯ" Всероссийского института научной и технической информации (ВИНИТИ) - Доступны следующие базы данных, содержащие информацию в области химии: Химия, Физико-химическая биология, Коррозия и защита от коррозии, Металлургия, Охрана окружающей среды, Обзоры.
- MDL Information Systems – информационно-поисковая система для ученых в области естественных наук и химии,
- MDL Drug Data Report (MDDR) - база данных, содержащая более 100,000 соединений (MDL Information System Inc.)
- AntiBase 2.0 – база данных по более чем 20 000 природных веществ.

9.4 Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы:

1. Программа ChemLab. – для проведения виртуальных химических экспериментов.
2. Программа MathLab – для моделирования влияния условий химических реакций, катализаторов и ингибиторов на выход продуктов при проведении экспериментов.
3. Программа Statistica – для анализа экспериментальных данных, визуализации полученных результатов, статистическая обработка результатов.

9.5 Описание материально-технической базы.

Для реализации программы подготовки по дисциплине (модулю) «Термохимия биологических процессов» перечень материально-технического обеспечения включает:

1. Специализированные аудитории для проведения лекций с мультимедийным оборудованием и выходом в Интернет.
2. Специализированные химические лаборатории для проведения физико-химических исследований

3. Специализированные аудитории с компьютерами, специальное программное обеспечение для постановки экспериментов, обсчета полученных результатов.

Кафедра располагает закрепленными за ней учебными аудиториями, специализированными химическими лабораториями, физико-химическим оборудованием, другими приборами и инструментами в соответствии с перечнем оборудования.

9.5.1 Требования к аудиториям (помещениям, местам) для проведения занятий.

Для проведения теоретических занятий по дисциплине «Термохимия биологических процессов» необходимы:

специальные помещения, лаборатории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для самостоятельной работы и помещения для хранения и профилактического обслуживания оборудования.

Специализированная химическая лаборатория должна быть оборудована столами для проведения химических опытов, вытяжкой с приточной и вытяжной вентиляцией.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся должны быть оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации.

9.5.2 Требования к специализированному оборудованию

Проведение занятий осуществляется в аудиториях, оборудованных приборами для проведения физико-химических исследований.

В лаборатории необходимо иметь: дистилляторы (типа АДЭа-10, АДЭа-25), кондуктометры (типа АКП-02, АНИОН-4120, АНИОН-4150, МАРК-603, HANNA), иономеры (типа рН-011МП, рХ-150, АНИОН-4101), вискозиметры (типа ВПЖ-1, ВПЖ-2), приборы для измерения поверхностного натяжения (Тензиометр типа К6, К9), калориметры (типа С-2000), поляриметры (типа СМ-3, П-161М), рефрактометры (типа ИРФ-464, ИРФ-470, АЛР-3), приборы для проведения электрофореза (типа КАПЕЛЬ-103М), потенциометры (типа ИПЛ-101, ИПЛ-111), аналитические весы (типа ВЛ-210, ВЛ-210), технические весы (ВМ-510), термостаты (жидкостные серии Т-2, Т-3), термометры (ртутные, цифровые типа ТЦ-1200), спектрофотометры (типа КФК-3, ЭКСПЕРТ-003), пламенные фотометры (серия ФПА-378, ФПА-354, ФПА-22), оптические микроскопы (типа Микмед-6, ПОЛАМ РП-1), газовые и жидкостные хроматографы, комплекс для термохимических исследований, соответствующую химическую посуду и химические реактивы, термоаналитический комплекс.

10. Методические рекомендации аспирантам по освоению дисциплины

(модуля)

При изучении дисциплины аспиранту необходимо посещать лекции, семинарские занятия, пройти тестирование по соответствующим разделам. При самостоятельной работе и подготовке к лекциям и занятиям необходимо обращать особое внимание на основные понятия, законы, формулы данного раздела, размерности всех величин в системе СИ, понимать значение для применения определяемых величин при изучении и описании объектов агросферы, а также тех объектов, которые изучает аспирант при выполнении диссертации.

11. Методические рекомендации преподавателям по организации обучения по дисциплине (модулю)

Проведение лекций и семинарских занятий в интерактивной форме, анализ конкретных ситуаций и принятие решений на основе результатов по физико-химическим и термохимическим характеристикам биологических объектов.

Оргдеятельностные игры с целью выработки инновационного решения проблемы (задачи) в рамках одного из разделов дисциплины, например, при разборе темы по коррозионно-электрохимическим процессам, протекающим при хранении и переработке продукции сельскохозяйственного производства. Полученное решение должно быть оптимальным и реализуемым. Необходимо использовать методы групповой работы для получения нестандартных, оперативных, новых решений. На основе выработанного решения составляются проект и программа исследования и его внедрения.

Проектные методы при изучении разделов по термодинамике, кинетике и химического равновесия, электрохимическим процессам с использованием математических программ SIMULINK пакета MathLab.

Использование деятельностного подхода.

Продуктивное обучение.

Использование метода Кейс-стади на семинарских занятиях по изучаемым разделам, в частности, при изучении разделов по коллоидно-химическим свойствам почв и высокомолекулярным соединениям.

Автор рабочей программы:

Профессор, к.х.н., д.с.-х.н. Белопухов С.Л.

_____ (подпись)