

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич  
Должность: врио ректора  
Дата подписания: 16.05.2024 13:02:41  
Уникальный программный ключ:  
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**  
**ФГБОУ ВО «ТВЕРСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

24 апреля 2024 г.



Рабочая программа дисциплины

**Физико-химические расчеты в биомедицине**

- Закреплена за кафедрой: **Физической химии**
- Направление подготовки: **04.03.01 Химия**
- Направленность (профиль): **Экспертная и медицинская химия**
- Квалификация: **Бакалавр**
- Форма обучения: **очная**
- Семестр: **5,6**

Программу составил(и):  
*канд. хим. наук, доц., Белоцерковец Нина Ивановна*

Тверь, 2024

## 1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

### Цели освоения дисциплины (модуля):

Цель освоения дисциплины - овладение методами математической обработки числовых данных физико-химических измерений и углубленное изучение основных принципов феноменологической теории и ее применение при решении задач расчета и прогнозирования физико-химических свойств веществ, необходимых для практики и не изученных экспериментально.

### Задачи:

- освоить основные методы первичной статистической обработки числовых данных физико-химических измерений;
- уметь строить аддитивные схемы и применять их при расчетах физико-химических свойств веществ;
- использовать построенные аддитивные схемы для прогнозирования физико-химических свойств веществ

## 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ОП: Б1.В

### Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Требуемый уровень подготовки обучающихся для успешного освоения дисциплины: иметь представление об основных законах физической химии, знать математику и физику (в пределах общих курсов, изучаемых химиками).

Физика

Математика

Новые информационные технологии

Строение вещества

Информатика

**Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:**

Методика научного исследования

Преддипломная практика

Физические методы исследования

## 3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

<b>Общая трудоемкость</b>	5 ЗЕТ
Часов по учебному плану	180
<b>в том числе:</b>	
аудиторные занятия	122
самостоятельная работа	31
часов на контроль	27

## 4. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

ПК-1.1: Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР

ПК-1.2: Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР

ПК-1.3: Готовит объекты исследования

ПК-2.1: Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных)

ПК-2.2: Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)

### 5. ВИДЫ КОНТРОЛЯ

Виды контроля в семестрах:	
экзамены	6
зачеты	5

### 6. ЯЗЫК ПРЕПОДАВАНИЯ

Язык преподавания: русский.

### 7. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Код занят.	Наименование разделов и тем	Вид занятия	Семестр / Курс	Часов	Источники	Примечание
	Раздел 1. 1. Математические основы работы с числовыми данными					
1.1	Физические величины. Вычисления. Числа.	Лек	5	2		
1.2	Значащие цифры. Округление. Форма представления результатов вычислений	Лаб	5	4		
	Раздел 2. 2. Основы статистической обработки результатов эксперимента					
2.1	Методы статистики. Задачи и способы первичной обработки результатов эксперимента. Статистические распределения. Применение в физико-химических расчетах	Лек	5	14		
2.2	Выборки экспериментальных данных Ранжирование выборки данных Гистограммы распределения результатов. Графические способы построения гистограмм. Работа с программой Excel. Работа с программой Ориджин	Лаб	5	14		
2.3	Конспекты учебного материала по теме занятия	Ср	5	2		
	Раздел 3. 3. Погрешности измерений					

3.1	Причины возникновения погрешностей. Классификация погрешностей Случайные погрешности и способ их определения. Систематические погрешности и способы их оценки. Грубые погрешности (промахи) и их выявление.	Лек	5	18		
3.2	Расчет приборных погрешностей в различных методах: Гравиметрия; Титриметрия; Спектроскопия и др. Расчет стандартного отклонения результатов измерений. Оценка грубых ошибок измерения (4 метода). Расчет постоянной систематической ошибки. Расчет процентной систематической ошибки..	Лаб	5	16		
3.3	Конспекты учебных материалов по теме занятия	Ср	5	2		
	Раздел 4. 4. Схемы расчета свойств в ряду изомеров замещения базисного соединения					
4.1		Лек	6	8		
4.2		Лаб	6	16		
4.3		Ср	6	10		
	Раздел 5. 5. Корреляции «структура – свойство алкана» на основе топологических индексов матрицы расстояний					
5.1		Лек	6	6		
5.2		Лаб	6	12		
5.3		Ср	6	10		
	Раздел 6. 6. Корреляции «структура– свойство» веществ на основе топологических индексов матрицы смежности					
6.1		Лек	6	4		
6.2		Лаб	6	8		
6.3		Ср	6	7		

	Раздел 7. 7. Контроль					
7.1		Экзамен	6	27		

### Список образовательных технологий

1	Информационные (цифровые) технологии
2	Активное слушание
3	Тренинг

## 8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

### 8.1. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации

Приложение 1

### 8.2. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

### 8.3. Требования к рейтинг-контролю

Виды рейтинг-контроля

Рейтинг-контроль по данной дисциплине проводится в течение каждого семестра в соответствии с действующим Положением о рейтинговом контроле. Рейтинг-контроль состоит из двух модулей и итогового контроля ( 5 семестр – зачет; 6 семестр – экзамен). Каждый модуль включает в себя результаты текущей работы во время аудиторных занятий и контрольную (письменную) работу. Практикуются также рефераты и/или презентации. Учитывается посещение занятий.

Семестр 5 (всего 100 баллов)

Рейтинг-контроль проводится по результатам текущей работы в течение семестра и включает оценку результатов выполнения лабораторных работ, качество усвоения лекционного материала, посещение аудиторных занятий.

Для получения зачета необходимо правильно выполнить не менее 50% лабораторных работ.

I модуль (максимум 40 баллов)

II модуль (максимум 40 баллов)

Зачет (максимум 20 баллов)

Итого (5 семестр): 100 баллов.

Семестр 6 (всего 100 баллов)

I модуль (максимум 30 баллов)

Математическая модель, построение математической модели, основные этапы математического моделирования. Вычислительный эксперимент.

Постановка математической задачи. Решение математической задачи. Общая погрешность решения задачи.

Методы численного решения задач. Вычислительные методы в физике и химии.

Внутримолекулярные взаимодействия. Валентные и невалентные взаимодействия (подсчеты числа взаимодействий в разных молекулах). Эквивалентность взаимодействий.

**II модуль (максимум 30 баллов)**

Феноменологические методы. Исходные физические предпосылки. Основной постулат. Общая математическая модель. Связь с квантовой механикой. Межмолекулярная составляющая.

Построение схем расчета и прогнозирования для отдельных классов химических соединений (замещенных метана и его аналогов, этана, пропана, этилена, бензола, циклопропана и др.). Вывод рабочих формул. Установление взаимосвязи между различными схемами. Предсказательные возможности теории.

Определение параметров схем расчёта. Система линейных алгебраических уравнений. Метод наименьших квадратов. Результаты расчёта. Погрешности: средняя абсолютная ошибка расчета, максимальное отклонение. Сопоставление с экспериментом.

Экзамен (максимум 40 баллов)

Итого (6 семестр): 100 баллов.

## **9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

### **9.1. Рекомендуемая литература**

#### **9.3.1 Перечень программного обеспечения**

1	Kaspersky Endpoint Security 10 для Windows
2	Adobe Acrobat Reader
3	Google Chrome
4	WinDjView
5	OpenOffice
6	Foxit Reader
7	Notepad++
8	ISIS Draw
9	Origin 8.1 Sr2
10	Многофункциональный редактор ONLYOFFICE

#### **9.3.2 Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы**

1	Репозиторий ТвГУ
2	Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU (подписка на журналы)
3	ЭБС ТвГУ
4	ЭБС BOOK.ru
5	ЭБС «Лань»
6	ЭБС IPRbooks
7	ЭБС «Университетская библиотека онлайн»
8	ЭБС «ЮРАИТ»
9	ЭБС «ZNANIUM.COM»

**10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

Аудит-я	Оборудование
3-243	комплект учебной мебели, компьютеры
3-408	комплект учебной мебели, переносной ноутбук, проекторы, абсорбциометр, телефоны, ареометр, барометр анероид, дрель, колонки, мешалка магнитная,

**11. МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ**

## Методические указания к лабораторным работам

На лабораторных занятиях разбираются ключевые (узловые) вопросы предмета с целью более глубокого их понимания. Практикуется широкое использование ПК (например, методы компьютерной графики) и других технических средств (молекулярные модели, видеозаписи лекций преподавателя и т.п.). Проводятся также небольшие работы по закреплению лекционного материала. Результаты работ учитываются при рейтинг-контроле.

## Методические рекомендации по организации самостоятельной работы

Самостоятельная работа проводится с целью углубления и закрепления полученных в ходе лекционных занятий знаний и приобретение навыков пользования рекомендованной литературой, навыков научного исследования.

Самостоятельная работа начинается с работы над лекционным материалом. Она включает конспектирование лекций и последующую работу с учебником. При работе над текстом лекции студенту следует обратить особое внимание на основные понятия изучаемой темы, а так же на указания и рекомендации преподавателя по выполнению задания.

## Перечень основных понятий, изучение которых предусмотрено данной дисциплиной

Вычислительная математика  
 Вычислительные методы в физике и химии  
 Математическая модель  
 Математическое моделирование  
 Взаимодействия атомов  
 Валентные и невалентные взаимодействия  
 Изомерия. Виды изомерии  
 Энтальпия образования. Энтропия. Энергии Гиббса. Теплота испарения  
 Численные расчеты  
 Расчетные схемы. Взаимосвязь между различными расчетными схемами  
 Метод наименьших квадратов (МНК)

Рекомендации для подготовки к зачету  
(5 семестр)

Дисциплина «Физико-химические расчеты» изучается в 5-м и 6-м семестрах. В 5 семестре учебным планом предусмотрен зачет.

## Вопросы для подготовки к зачету

1. Математические основы работы с числовыми данными химического эксперимента. Значение цифры, правила округления.
2. Физические величины, точность и результаты их измерения.
3. Статистическое распределение (ряд) результатов и его графическое представление. Гистограммы. Типы статистических распределений.

4. Порядок проведения первичной статистической обработки экспериментальных данных и представления окончательных результатов в стандартной форме. Доверительный интервал значений
5. Классификация погрешностей измерения. Систематические и случайные погрешности. Приборные погрешности.
6. Методы оценки грубых погрешностей измерения (правило трех сигма и др.)
7. Суммарная погрешность. Правила сложения ошибок в химическом анализе.

Рекомендации для подготовки к экзамену  
(6 семестр)

Дисциплина «Физико-химические расчеты» изучается в 5-м и 6-м семестрах. В 5 семестре учебным планом предусмотрен зачет, в 6 семестре экзамен. Экзамен включают в себя 1) устные ответы на вопросы, 2) результаты рейтинг-контроля

При ответах на вопросы принимается во внимание знание и понимание по существу материала, его полнота и глубина освещения, аргументированность, культура речи и пр. При ответе следует четко давать определения понятий, дополнять каждый теоретический вопрос соответствующими примерами.

В ходе экзамена преподаватель имеет право задавать дополнительные вопросы.

## ПРИЛОЖЕНИЕ 1.

### Дисциплина: «ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ»

#### Форма промежуточной аттестации и семестр прохождения:

Зачет в 5-м семестре,

Экзамен в 6-м семестре.

### Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации 5 СЕМЕСТР

#### *Вопросы и задания для проведения текущей аттестации*

##### *Рекомендации к выполнению заданий*

При выполнении задания необходимо следовать методическим указаниям к работе.

1. Внимательно прочитать указания к работе
2. Работать самостоятельно
3. Создать файл «ФИО-Работа №\_»
4. Указать: дату, ФИО, тему занятия, вопросы
5. Последовательно ответить на все вопросы, обязательно пользуясь текстом учебного пособия.

При этом основное внимание следует уделить:

- Осмыслению терминов и понятий по теме занятия
- Основным закономерностям вычислений
- Последовательности действий при расчетах
- Расчетным формулам (*расшифровать обозначения, указать единицы измерения*)
- Условиям и ограничениям в использовании расчетных методов

6. Файл отчета отредактировать

7. Замечания преподавателя не удалять, исправления ошибок сделать под заголовком «Доработка».

#### Задание 1.

### ОБЩИЕ ПРАВИЛА МАТЕМАТИЧЕСКИХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

1. Что такое «Значащие цифры» и как что они значат?
2. Перечислить правила округления чисел.
3. Перечислить правила записи окончательного результата измерения в стандартной форме.

#### Задание 2.

### ПОГРЕШНОСТИ ИЗМЕРЕНИЙ



1. Что такое погрешность измерения? Как ее оценивают?
2. Чем абсолютная погрешность отличается от относительной?
3. Чем характеризуют качество измерения?
4. Каковы причины появления промахов ?
5. Что такое систематическая погрешность?
6. Какова роль модельных несоответствий в развитии науки?
7. Что такое случайная погрешность? Какие причины приводят к ее появлению?
8. Перечислить возможные источники погрешностей измерений.

#### Задание 3.

### СЛУЧАЙНЫЕ ПОГРЕШНОСТИ

1. Основные термины, обозначения и формулы расчета (*Среднее значение; дисперсия; Среднее квадратичное отклонение; доверительный интервал, доверительная вероятность, коэффициент Стьюдента*)
2. Правила расчета среднего квадратичного отклонения

#### Задание 4.

### ЗАКОНЫ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ СЛУЧАЙНЫХ ВЕЛИЧИН

1. Как можно графически представить статистическое закон нормального распределения случайных величин (гистограмму) – что рассчитывают, что откладывают по осям графика?
2. Что такое генеральная совокупность случайных величин? Что такое случайная выборка результатов?
3. Чем характеризуется кривая нормального распределения (кривая Гаусса)?
4. Как характеризуется кривая стандартного нормального распределения случайных величин? Что характеризует нормированная функция Лапласа?
5. Доверительная вероятность, уровень значимости и их рекомендуемые значения.
6. Как зависит погрешность результата от числа измерений?
7. Метод малых выборок (основания, возможности и условия применения). Распределение Стьюдента (t-распределение). Степень свободы (f).

#### Задание 5.

### ИСКЛЮЧЕНИЕ ГРУБЫХ ОШИБОК: ПРАВИЛО ТРЕХ СИГМ

1. Какие погрешности называют грубыми? Что делают с такими погрешностями при их обнаружении?
2. Сформулировать правило трех сигм для исключения грубых ошибок.
3. Какой смысл имеет величина сигма?
4. Какой закон распределения плотности случайной величины характеризует правило трех сигм?
5. Какой процент случайных величин попадает в интервал  $\pm 3$ сигма?

#### Задание 6.

### ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОСТОЯННОЙ СИСТЕМАТИЧЕСКОЙ ОШИБКИ

1. По каким критериям определяют одновременно наличие постоянной и переменной систематической ошибки?. Какие значения могут иметь эти критерии в случае наличия систематических ошибок?
2. Описать условия применимости метода проверки наличия систематической ошибки по текущим анализам
3. Как определить по текущим анализам наличие постоянной систематической ошибки? Указать последовательность действий и правила расчета.
4. По данным ПРИМЕРА оценить наличие постоянной систематической ошибки в приведенных результатах измерения.

#### Задание 7.

### ОБЩИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ СЛОЖЕНИЯ ОШИБОК

1. Математическое выражение для суммарной ошибки;
2. Четыре вида уравнений для расчета суммарной ошибки.
3. Когда для расчета суммарной ошибки используют *абсолютные* ошибки, а когда *относительные*?

#### Задание 8.

### ОСОБЕННОСТИ СЛОЖЕНИЯ ОШИБОК ПРИ АНАЛИТИЧЕСКИХ ОПЕРАЦИЯХ

1. Как определить ошибку взвешивания?

2. Условия уменьшения ошибки гравиметрического метода
3. Как определяется *ошибка при делении пробы (разбавлении)* в объемном анализе?
4. Расчет *ошибки определения титра* раствора и способы ее уменьшения.

#### Задание 9.

#### ПЕРЕМЕННАЯ СИСТЕМАТИЧЕСКАЯ ОШИБКА

1. По каким критериям определяют наличие *переменной* систематической ошибки в методе одновременного их определения? Какие значения могут иметь эти критерии в случае наличия систематических ошибок?
2. Как определить по текущим анализам наличие *переменной* систематической ошибки? Указать последовательность действий и правила расчета.
3. По данным ПРИМЕРА\_оценить наличие *переменной* систематической ошибки в приведенных результатах измерения.

#### Рекомендации для выполнения контрольных работ

Для своего ВАРИАНТА экспериментальных данных произвести все необходимые действия и расчеты для определения доверительного интервала значений измеренной величины для заданной доверительной вероятности.

*Рекомендуется:*

- 1) *составить последовательность расчетов*
- 2) *результаты сразу оформлять в таблицу*
- 3) *приводить формулы и подставлять в них числа промежуточных расчетов*
- 4) *Не забыть округлить результат до правильной значащей цифры.*

#### Контрольная работа 1.

Рассчитать среднюю квадратичную ошибку  $S$  измерений и оценку доверительных границ  $\varepsilon$  для доверительной вероятности  $p=0.95$ .

#### Контрольная работа 2.

Для своего ВАРИАНТА данных проверить наличие грубых ошибок измерения по методу  $t$ -значений (для доверительной вероятности 0.90)

#### Контрольная работа 3.

Выписать порядок проведения расчетов определения грубых ошибок по методу  $4\bar{D}$  значений  
Для своего ВАРИАНТА данных проверить наличие грубых ошибок измерения по методу  $4\bar{D}$  значений.

#### Контрольная работа 4.

Составить порядок проведения расчетов для исключения грубых ошибок в результатах измерений с помощью  $Q$ -критерия.

Для своего ВАРИАНТА данных проверить наличие грубых ошибок с помощью  $Q$ -критерия.

#### Типовые контрольные задания для промежуточного контроля

Результат (индикатор)	Формулировка задания	Вид работы / способ	Критерии оценивания
ПК-1.1	<p><i>Задание 1. Составить план проведения расчета доверительного интервала значений измеряемой величины с использованием одной из стандартных компьютерных программ.</i></p> <p><i>Задание 2. Составить алгоритм действий для расчета среднеквадратичного отклонения значений измеряемой величины.</i></p>	Творческое задание/Письменная работа	<p>Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла;</p> <p>Дано верное решение, но допущены не существенные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2 балла;</p>

			Имеется верное решение только части задания– 1 балл.
ПК-1.2	<p><i>Задание 1.</i> Определить наличие грубых ошибок в результатах измерений физико-химического свойства вещества по методу трех сигм.</p> <p><i>Задание 2.</i> Определить доверительный интервал значений измеряемой величины с помощью программы Origin</p> <p><i>Задание 3.</i> Произвести расчет среднеквадратичного отклонения результатов аналитического определения содержания основного вещества в исследуемом образце с использованием одной из стандартных компьютерных программ.</p>	Письменная работа	Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла– 2 балла; Имеется верное решение только части задания– 1 балл.
ПК-1.3	<p><i>Задание 1.</i> Серию результатов измерений физической величины представить в таблице статистического распределения относительных частот .</p> <p><i>Задание 2.</i> С помощью программы Excel рассчитать среднеквадратичное отклонение и доверительный интервал значений для заданного статистического распределения результатов измерений физической величины.</p>	Письменная работа	Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла– 2 балла; Имеется верное решение только части задания– 1 балл.
ПК-2.1 ПК-2.2	<p><i>Задание 1.</i> По литературным данным определить наличие грубых ошибок в серии аналитических измерений.</p> <p><i>Задание 2.</i> С помощью стандартных компьютерных программ провести первичную статистическую обработку серии литературных экспериментальных данных и представить результаты в стандартной форме.</p> <p><i>Задание 3.</i> С помощью программы Excel рассчитать среднеквадратичное отклонение опубликованных результатов измерений физико-химического свойства вещества.</p>	Творческое задание/Письменная работа	Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла– 2 балла; Имеется верное решение только части задания– 1 балл.

6 СЕМЕСТР

Критерии оценки освоения компетенций бакалаврами по дисциплине  
«Физико-химические расчеты»

№	Результат (индикатор)	Вид работы / способ	Критерии оценивания
1	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-2.1 ПК-2.2	<p><b>вид:</b> решение задач в рамках лабораторных занятий по темам-4-6</p> <p><b>способ:</b> традиционный</p> <p><b>результаты:</b> углубленная проработка темы</p> <p>Выполнение лабораторных работ является <i>необходимым, но не достаточным</i> условием получения положительной оценки</p>	<p><b>30 баллов</b></p> <p>Активная работа на занятии – решение у доски <b>2 балла</b></p>
2		<p><b>вид:</b> выполнение самостоятельной работы</p> <p><b>способ:</b> на компьютере</p> <p><b>результаты:</b> 1. обзор темы своей научной работы, методики и объектов исследования, представленный в виде презентации 2. список патентов по заданной теме, осуществленный по базам данных, оформленный в соответствии с требованиями.</p> <p>Выполнение самостоятельной работы по индивидуальной теме является <i>необходимым, но не достаточным</i> условием получения положительной оценки</p>	<p><b>5 баллов</b> – отчет по самостоятельной работе за семестр представлен в виде презентации, оформлен по требованиям, содержит информацию по всем заданиям; <b>4 балла</b> – отчет по самостоятельной работе за семестр представлен в виде презентации, оформлен по требованиям, содержит информацию более 3/4 от всех заданий; <b>3 балла</b> – отчет по самостоятельной работе за семестр оформлен не в соответствии с требованиями, содержит информацию более 3/4 от всех заданий; <b>2 балла</b> – отчет по самостоятельной работе за семестр оформлен не в соответствии с требованиями, содержит информацию более 2/4 от всех заданий; <b>1 балл</b> – отчет по самостоятельной работе за семестр не полон (представлено менее 2/4 от всех заданий), не оформлен в соответствии с требованиями; <b>0 баллов</b> – задания не выполнены, отчет не представлен.</p>
3		<p><b>вид:</b> контрольная модульная работа № 1 контрольная модульная работа № 2</p> <p><b>способ:</b> традиционный</p> <p><b>результаты:</b> оформленные по заданию</p>	<p><b>10 баллов</b> <b>10 баллов</b></p>

		бумажные бланки с решениями	
4		Посещаемость	0,5 – 1 занятие (3 академических часа)
5		<b>Итого:</b>	<b>60 баллов</b> на семестр
6	<b>Экзамен</b>		<b>40 баллов</b>
<b>Всего</b>			<b>100 баллов</b>

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ (ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ)  
для проведения диагностической работы в рамках аккредитационных показателей  
по образовательным программам высшего образования**

04.03.01, Химия, Перспективные материалы: синтез и анализ

ПК-1 Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации.

ПК-1.1. Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР

ПК-1.2. Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР

ПК-1.3. Готовит объекты исследования

Номер задания	Правильный ответ (ключ)	Содержание вопроса/задания	Критерии оценивания заданий
<b>ПК-1.1. Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР</b>			
<i><b>Задания закрытого типа</b></i>			
1	В	<i>Выбрать один правильный ответ: 1. При первичной математической обработке результатов серии измерений что нужно сделать в первую очередь:: А. Найти среднее арифметическое? Б. Найти суммарную ошибку? В. Определить наличие грубых ошибок измерения? Г. Определить доверительный интервал значений?</i>	<b>1 балл</b> - правильно
2	Это отклонение (отличие) полученного значения от истинного значения измеряемой величины.	Что такое погрешность измерения?	<b>1 балл</b> - правильно
3	Г-А-В-Б-Д	Выбрать правильную последовательность действий при первичной обработке результатов измерения: А - Расчет среднего арифметического Б - Расчет среднеквадратичного отклонения В - Расчет отклонения каждого результата от среднего арифметического Г - Ранжирование исходных данных Д - Определение доверительного интервала полученного результата	<b>3 балла</b> - правильно; <b>2 балла</b> – одна ошибка; <b>1 балл</b> – две ошибки; <b>0 баллов</b> - три и более ошибок.

4	Расположить результаты в ряд от наименьшего к наибольшему значению.	Что нужно сделать при ранжировании серии исходных данных измерения?	1 балл - правильно			
5	Б	Чем характеризуется случайная погрешность измерения: А – средним арифметическим значением? Б – среднеквадратичным отклонением? В – грубой ошибкой (промахом)?	1 балл			
<b>Задания открытого типа</b>						
6	<p>Рассчитать среднее арифметическое <math>\bar{X}_{ср}</math> для следующей серии результатов <math>x_i</math> из трех измерений:</p> <table border="1" style="margin-left: auto; margin-right: auto;"> <tr><td><math>x_i</math></td></tr> <tr><td>10.10</td></tr> <tr><td>9.90</td></tr> <tr><td>9.80</td></tr> </table> <p>Правильный ответ (ключ):</p> <p>1) Суммируем все результаты  <math>\sum x_i = 29.80</math></p> <p>2) Значение среднего арифметического находим делением полученной суммы на число измерений;  <math>\bar{X}_{ср} = 29.80/3 = 9.9333...</math></p> <p>3) В ответе округляем результат с учетом значащих цифр исходных данных измерений:  <math>\bar{X}_{ср} = 9.9333... \approx 9.93</math></p>	$x_i$	10.10	9.90	9.80	3 балла
$x_i$						
10.10						
9.90						
9.80						
7	<p style="text-align: center;"><i>Вставить пропущенное слово:</i></p> <p>Обработку результатов измерений нужно начинать с проверки наличия _____ (каких?) _____ ошибок.</p> <p>Правильный ответ (ключ):  «грубых» (или «промахов»)</p>	1 балл - правильно				
8	<p>Указать последовательность действий при первичной обработке результатов измерений <math>X_i</math> физической величины:</p> <p>Правильный ответ (ключ):</p> <p>1) Ранжируем результаты <math>X_i</math> и проверяем наличие грубой ошибки (промаха) в результатах измерений. Найденные промахи отбрасываем</p> <p>2) Считаем среднее арифметическое <math>\bar{X}_{ср}</math> результатов измерений</p> <p>3) Находим отклонение каждого результата измерения от среднего арифметического <math>\Delta X_i</math></p> <p>4) Считаем среднее квадратичное отклонение <math>S_x</math> результатов для данного числа измерений</p> <p>5) Определяем доверительный интервал значений</p>	<b>5 баллов-правильно:</b> 1) 1 балл 2) 1 балл 3) 1 балл 4) 1 балл 5) 1 балл				
9	<p>Представить порядок расчета среднеквадратичного отклонения <math>S_x</math> серии из <math>n</math>-измерений (<math>n &lt; 10</math>) величины <math>x_i</math>.</p> <p>Правильный ответ (ключ):</p> <p>1) Расчет среднего значения величины <math>\bar{x}</math>: <math>\bar{x} = \sum x_i / n</math></p> <p>2) Расчет отклонения <math>d_i = \bar{x} - x_i</math> для каждого результата</p>	<b>3 балла -правильно:</b> 1) 1 балл 2) 1 балл 3) 1 балл				

	3) Расчет среднего квадратичного отклонения $S_x = \sqrt{\sum (d_i)^2 / n - 1}$		
10	Представить порядок расчета среднего отклонения для следующих результатов серии измерений:  <i>Правильный ответ (ключ):</i> 1) Расчет среднего значения величины $\bar{x}$ : $\bar{x} = \sum x_i / n$ 2) Расчет отклонения каждого результата: $d_i = \bar{x} - x_i$ 3) Расчет среднего отклонения $d_{cp} = \sum (\bar{x} - x_i) / n$		<b>3 балла</b> – правильно:  1) 1 балл 2) 1 балл 3) 1 балл
<b>ПК 1.2. Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР</b>			
<b>Задания закрытого типа</b>			
11	Б	Чем характеризуется случайная погрешность измерения: А – средним арифметическим значением? Б – среднеквадратичным отклонением? В – грубой ошибкой (промахом)?	<b>1 балл</b> - правильно
12	В	Как зависит значение случайной погрешности результата от числа измерений: А – увеличивается с увеличением числа измерений? Б – не зависит от числа измерений? В – уменьшается с увеличением числа измерений?	<b>1 балл</b> - правильно
13	Г	Среднее арифметическое значение выборки экспериментальных данных рассчитывают как: <i>А. Частное от деления суммы отклонений (<math>x_i - \bar{x}</math>) всех значений выборки на число измерений.</i> <i>Б. Корень квадратный из суммы значений всех измерений.</i> <i>В. Корень квадратный из частного от деления суммы отклонений (<math>x_i - \bar{x}</math>) всех значений выборки на число измерений.</i> <i>Г. Частное от деления суммы всех значений выборки на число измерений</i>	<b>1 балл</b> - правильно
14	В	Среднее квадратичное отклонение серии экспериментальных данных рассчитывают как: <i>А. Частное от деления суммы отклонений (<math>x_i - \bar{x}</math>) всех значений выборки на число измерений.</i> <i>Б. Корень квадратный из суммы значений всех измерений.</i> <i>В. Корень квадратный из частного от деления суммы квадратов отклонений (<math>x_i - \bar{x}</math>) всех значений выборки на число измерений минус один.</i> <i>Г. Частное от деления суммы всех значений выборки на число измерений</i>	<b>1 балл</b> - правильно

15	Б	Для первичной статистической обработки результатов измерений можно использовать аппаратуру: А. Фотоколориметр. Б. Персональный компьютер В. Рефрактометр. Г. Спектрофотометр.	<b>1 балл</b> - правильно						
<b>Задания открытого типа</b>									
16		Вставить пропущенное слово: Грубые ошибки измерений могут быть обусловлены неправильной работой используемого ____ (чего?) ____.  Правильный ответ (ключ): «прибора» или «устройства» и т.п.	<b>1 балл</b> - правильно						
17		Провести ранжирование приведенных результатов серии измерений массы образца (г): 19.15; 19,10; 19,00; 18.95; 19.22  Правильный ответ (ключ): 1) ранжировать – значит расположить результаты по возрастанию значений 2) Исходные данные нужно расположить в порядке: 18.95; 19,00; 19,10; 19.15; 19.22	<b>2 балла</b> – правильно:  1) 1 балл 2) 1 балл						
18		Рассчитать среднее арифметическое $\bar{X}_{ср}$ для следующей серии результатов $x_i$ из пяти измерений: <table border="1" style="margin-left: auto; margin-right: auto;"><tr><td><math>x_i</math></td></tr><tr><td>67.9</td></tr><tr><td>67.3</td></tr><tr><td>67.3</td></tr><tr><td>67.4</td></tr><tr><td>67.5</td></tr></table> Правильный ответ (ключ): 1) Суммируем все результаты $\sum x_i = 337,4$ 2) Значение среднего арифметического находим делением полученной суммы на число измерений; $\bar{X}_{ср} = 337,4/5 = 67.48$ 3) В ответе округляем результат с учетом значащих цифр исходных данных измерений: $\bar{X}_{ср} = 67.48 \approx 67,5$	$x_i$	67.9	67.3	67.3	67.4	67.5	<b>3 балла</b> – правильно:  1) 1 балл 2) 1 балл 3) 1 балл
$x_i$									
67.9									
67.3									
67.3									
67.4									
67.5									
19		Определить методом $4D_{ср}$ наличие грубой ошибки в следующих результатах измерений объема раствора ( $V_i$ , мл): 10.0; 10,5; 9,8; 9,5; 10,1.  Правильный ответ (ключ): 1) Ранжируют данные: 9,8; 9,9; 10,0; 10,1; <b>10,5</b> ; и отбрасывают наиболее отличающееся крайнее значение 10,5 2) По оставшимся данным считают среднее арифметическое $\bar{V}_{ср}$ : $\bar{V}_{ср} = (9,8 + 9,9 + 10,0 + 10,1) / 4 = 9,95$ 3) Вычисляют отклонение $\Delta V_i$ каждого результата от среднего арифметического: получают 0.15; 0.05; 0.05; 0.06 4) Находят среднее отклонение $D_{ср}$ результатов от $\bar{V}_{ср}$ и	<b>5 баллов</b> – правильно:  1) 1 балл 2) 1 балл 3) 1 балл						



	<p>значение <b>4 Dcp</b>:  <math>D_{cp} = \sum  V_i - V_{cp}  / 4 = (0.15 + 0.05 + 0.05 + 0.06) / 4 = 0.078 \approx 0.08</math>  Тогда <math>4 D_{cp} = 0.084 = 0.32</math></p> <p>5) Считают отклонение по модулю проверяемого значения 10.5 от среднего арифметического <b>Vcp</b>:  <math> V - V_{cp}  = 10.5 - 9.95 = 0.55</math>,  и сравнивают полученный результат 0.55 со значением <math>4 D_{cp} = 0.32</math>. Получаем <math>0.55 &gt; 0.32</math>, то есть проверяемое значение 10.5 является грубой ошибкой.</p>	<p>4) 1 балл</p> <p>5) 1 балл</p>
20	<p><i>Вставить пропущенное слово:</i>  Грубые ошибки измерений могут быть обусловлены _____ (чем?) _____.</p> <p>_____</p> <p><i>Правильный ответ (ключ):</i>  Либо «ошибкой экспериментатора», либо «неисправностью прибора», либо «изменением внешних условий»</p>	1 балл – за один из правильных ответов

### ПК 1.3. Готовит объекты исследования

#### *Задания закрытого типа*

21	В	<p>Какие измерения содержат случайную погрешность:  А – некоторые?  Б – никакие?  В – любые?</p>	1 балл - правильно
22	Б	<p><i>Выбрать один правильный ответ:</i>  1. Численное значение результата измерения с помощью прибора необходимо округлять с учетом:  А. Времени измерения.  Б. Точности прибора  В. Количества проб.  Г. Химической природы вещества.</p>	1 балл - правильно
23	В	<p>Укажите минимально возможную погрешность измерения объема жидкости с помощью мерного цилиндра емкостью 10.0 мл и ценой деления 0,1 мл :  А – 0,1 мл  Б – 0.2 мл  В – 0.05 мл  Г – 1 мл</p>	1 балл - правильно
24	Верно	<p>Верно ли утверждение: «Случайная погрешность присутствует во всех результатах измерений»?</p>	1 балл - правильно
25	Да	<p>Содержит ли результат однократного измерения физической величины случайную ошибку? Да или нет?</p>	1 балл - правильно

#### *Задания открытого типа*

26	<p>Как можно уменьшить значение случайной погрешности результатов измерения образца?  _____</p> <p><i>Правильный ответ (ключ):</i>  Увеличить число измерений данного образца.</p>	1 балл - правильно
27	<p><i>Вставить пропущенное слово:</i>  При определении концентрации раствора методом объемного</p>	1 балл - правильно

	<p>анализа рекомендуется проводить измерение не менее ____ (какого количества?) ____ проб образца.</p> <p>_____</p> <p><i>Правильный ответ (ключ):</i> «трех»</p>																								
28	<p>Округлить значение среднего арифметического для следующих результатов измерений объема раствора <math>V_i</math>, если цена деления бюретки равна 0.1 мл: 5.6 мл; 5.3 мл; 5.4 мл.</p> <p>_____</p> <p><i>Правильный ответ (ключ):</i> 1) Считаем сумму измеренных значений объема, мл: <math>\sum V_i = 5.6 + 5.3 + 5.4 = 16.3</math> 2) вычисляем среднее арифметическое деление <math>V_{ср}</math> найденной суммы значений на число измерений: <math>V_{ср} = 16.3/3 = 5.333\dots</math> 3) Округляем полученный результат с учетом погрешности измерения объема раствора с учетом цены деления бюретки 0.1 мл: <math>V_{ср} = 5.333\dots \approx 5.3</math> мл</p>	<p><b>3 балла</b> – правильно:</p> <p>1) 1 балл</p> <p>2) 1 балл</p> <p>3) 1 балл</p>																							
29	<p>Определите по данным таблицы значение коэффициента Стьюдента (<math>t</math>) для серии из 4-х измерений для доверительной вероятности 0.95:</p> <p style="text-align: center;">Коэффициенты Стьюдента <math>t(\alpha, n)</math> для доверительной вероятности <math>\alpha</math> и количества измерений <math>n</math></p> <table border="1" style="margin-left: auto; margin-right: auto;"> <thead> <tr> <th rowspan="2"><math>n</math></th> <th colspan="2">Доверительная вероятность <math>\alpha</math></th> </tr> <tr> <th>0.68</th> <th>0.95</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>2</td> <td><b>2,0</b></td> <td><b>12,7</b></td> </tr> <tr> <td>3</td> <td><b>1,4</b></td> <td><b>4,3</b></td> </tr> <tr> <td>4</td> <td><b>1,3</b></td> <td><b>3,2</b></td> </tr> <tr> <td>5</td> <td><b>1,2</b></td> <td><b>2,8</b></td> </tr> <tr> <td>6</td> <td><b>1,2</b></td> <td><b>2,6</b></td> </tr> <tr> <td>7</td> <td><b>1,1</b></td> <td><b>2,4</b></td> </tr> </tbody> </table> <p>_____</p> <p><i>Правильный ответ (ключ):</i> Значение <math>t=3.2</math></p>	$n$	Доверительная вероятность $\alpha$		0.68	0.95	2	<b>2,0</b>	<b>12,7</b>	3	<b>1,4</b>	<b>4,3</b>	4	<b>1,3</b>	<b>3,2</b>	5	<b>1,2</b>	<b>2,8</b>	6	<b>1,2</b>	<b>2,6</b>	7	<b>1,1</b>	<b>2,4</b>	<p><b>1 балл</b> - правильно</p>
$n$	Доверительная вероятность $\alpha$																								
	0.68	0.95																							
2	<b>2,0</b>	<b>12,7</b>																							
3	<b>1,4</b>	<b>4,3</b>																							
4	<b>1,3</b>	<b>3,2</b>																							
5	<b>1,2</b>	<b>2,8</b>																							
6	<b>1,2</b>	<b>2,6</b>																							
7	<b>1,1</b>	<b>2,4</b>																							
30	<p style="text-align: center;"><i>Вставить пропущенное число:</i></p> <p>Коэффициент Стьюдента (<math>t</math>-значения) применяют при расчете среднеквадратичного отклонения <math>S_x</math> результатов измерений, если число измерений не превышает ____ (скольких?) ____.</p> <p>_____</p> <p><i>Правильный ответ (ключ):</i> «десяти (10)»</p>	<p><b>1 балл</b> - правильно</p>																							

**Рекомендации для подготовки к зачету  
(5 семестр)**

**Вопросы для подготовки к зачету**

1. Математические основы работы с числовыми данными химического эксперимента. Значащие цифры, правила округления.
2. Физические величины, точность и результаты их измерения.
3. Статистическое распределение (ряд) результатов и его графическое представление. Гистограммы. Типы статистических распределений.

4. Порядок проведения первичной статистической обработки экспериментальных данных и представления окончательных результатов в стандартной форме. Доверительный интервал значений
5. Классификация погрешностей измерения. Систематические и случайные погрешности. Приборные погрешности.
6. Методы оценки грубых погрешностей измерения (правило трех сигма и др.)
7. Суммарная погрешность. Правила сложения ошибок в химическом анализе.

### Рекомендации для подготовки к экзамену (6 семестр)

Дисциплина «Физико-химические расчеты» изучается в 5-м и 6-м семестрах. В 5 семестре учебным планом предусмотрен зачет, в 6 семестре экзамен. Экзамен включают в себя 1) устные ответы на вопросы, 2) результаты рейтинг-контроля

При ответах на вопросы принимается во внимание знание и понимание по существу материала, его полнота и глубина освещения, аргументированность, культура речи и пр. При ответе следует четко давать определения понятий, дополнять каждый теоретический вопрос соответствующими примерами.

В ходе экзамена преподаватель имеет право задавать дополнительные вопросы.

### Вопросы к итоговому экзамену по дисциплине

1. Математическая модель.
2. Математическое моделирование.
3. Методы решения задачи, к которой приводит математическая модель. Общая погрешность решения задачи.
4. Вычислительные методы в физике и химии.
5. Численные методы.
6. Молекула как система взаимодействующих атомов. Валентные и не-валентные взаимодействия.
7. Атом-атомное представление (общая математическая модель).
8. Принципы построения расчетных схем.
9. Схемы расчета свойств замещенных этана и его аналогов.
10. Схемы расчета свойств замещенных этилена.
11. Схемы расчета свойств замещенных бензола.
12. Схемы расчета свойств замещенных циклопропана.
13. Взаимосвязь между различными расчетными схемами.
14. Предсказательные возможности феноменологической теории.
15. Численные расчеты термодинамические свойства веществ (энтальпии образования, энтропии, энергии Гиббса, теплоты испарения).
16. Адекватность математической модели. Сопоставление результатов расчета с экспериментом.
17. Подсчитать число валентных и невалентных взаимодействий в молекулах этана и пропана (в шахматных конформациях).
18. Подсчитать число валентных и невалентных взаимодействий в молекулах этилена и бензола.
19. Подсчитать число валентных и невалентных взаимодействий в молекулах циклопропана и циклобутана (в последнем случае – для плоского 1. Определение параметров (в кДж/моль) МНК дает для энтальпий образования  $\square_f H^0_{298 (r)}$  X-замещенных метана при X = D, T, F, Cl:

$$\begin{aligned} \Delta_f H^0 \text{CH}_{4-l} \text{D}_l &= -74,829 - 4,409 l + 0,094 l^2 & (l = 0, 1, 2, 3, 4); \\ \Delta_f H^0 \text{CH}_{4-l} \text{T}_l &= -74,897 - 3,851 l + 0,086 l^2 & (l = 0, 1, 2, 3, 4); \\ \Delta_f H^0 \text{CH}_{4-l} \text{F}_l &= -73,38 - 170,76 l - 11,28 l^2 & (l = 0, 1, 2, 3, 4); \\ \Delta_f H^0 \text{CH}_{4-l} \text{Cl}_l &= -72,56 - 16,12 l + 2,46 l^2 & (l = 0, 1, 2, 3, 4). \end{aligned}$$

Рассчитать величины  $\square_f H^0_{298 (r)}$  дейтеро-, тритий-, фтор-, хлорзамещенных метана. Сопоставить результаты расчета с экспериментом.

22. Составить схемы расчёта свойств X-замещённых этана (в шахматных конформациях) при учете парных взаимодействий атомов. Провести численные расчеты энтальпий образования.

23. Составить схемы расчёта свойств X-замещённых бензола при учете парных взаимодействий атомов. Провести численные расчеты энтальпии образования.

### ***Виды рейтинг-контроля***

Рейтинг-контроль по данной дисциплине проводится в течение каждого семестра в соответствии с действующим Положением о рейтинговом контроле. Рейтинг-контроль состоит из двух модулей и итогового контроля ( 5 семестр – зачет; 6 семестр – экзамен). Каждый модуль включает в себя результаты текущей работы во время аудиторных занятий и контрольную (письменную) работу. Практикуются также рефераты и/или презентации. Учитывается посещение занятий.

#### ***Семестр 5 (всего 100 баллов)***

Рейтинг-контроль проводится по результатам текущей работы в течение семестра и включает оценку результатов выполнения лабораторных работ, качество усвоения лекционного материала, посещение аудиторных занятий.

Для получения зачета необходимо правильно выполнить не менее 50% лабораторных работ.

**I модуль** (максимум 40 баллов)

**II модуль** (максимум 40 баллов)

**Зачет** (максимум 20 баллов)

**Итого** (5 семестр): 100 баллов.

#### ***Семестр 6 (всего 100 баллов)***

**I модуль** (максимум 30 баллов)

Математическая модель, построение математической модели, основные этапы математического моделирования. Вычислительный эксперимент.

Постановка математической задачи. Решение математической задачи. Общая погрешность решения задачи.

Методы численного решения задач. Вычислительные методы в физике и химии.

Внутримолекулярные взаимодействия. Валентные и невалентные взаимодействия (подсчеты числа взаимодействий в разных молекулах). Эквивалентность взаимодействий.

**II модуль** (максимум 30 баллов)

Феноменологические методы. Исходные физические предпосылки. Основной постулат. Общая математическая модель. Связь с квантовой механикой. Межмолекулярная составляющая.

Построение схем расчета и прогнозирования для отдельных классов химических соединений (замещенных метана и его аналогов, этана, пропана, этилена, бензола, циклопропана и др.).

Вывод рабочих формул. Установление взаимосвязи между различными схемами.

Предсказательные возможности теории.

Определение параметров схем расчёта. Система линейных алгебраических уравнений. Метод наименьших квадратов. Результаты расчёта. Погрешности: средняя абсолютная ошибка расчета, максимальное отклонение. Сопоставление с экспериментом.

**Экзамен** (максимум 40 баллов)

**Итого** (6 семестр): 100 баллов.