

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Лельчицкий Игорь Давыдович
Должность: и.о. проректора по образовательной деятельности
Дата подписания: 18.06.2026 16:42:07
Уникальный программный ключ:
aa5b5ee17d97a2e4d94e98e995320af94f043ce2

УП: 04.03.01 Химия
ЭМХ 2025.plx

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



УТВЕРЖДАЮ
Руководитель ООП
Феофанова М.А.

"28" мая 2026 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):

д-р хим. наук, проф., Виноградова Марина Геннадьевна

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

Общая трудоемкость	5 ЗЕТ
Часов по учебному плану	180
в том числе:	
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)

№	Наименование разделов и тем	Вид занятия	Сем.	Часов	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: Гравимеирия; Титриметрия; Спектроскопия и др. Рачет стандартного отклонения результатов измерений. Оценка грубых ошибок измерения (4 метода). Расчет постоянной систематической ошибки. Расчет пееменной систематической ошибки..	Лаб	5	16	
3.3	Конспекты учебных материалов по теме занятия	Ср	5	2	
	Раздел 4. 4. Аддитивные схемы расчёта				
4.1		Лек	6	8	
4.2		Лаб	6	16	
4.3		Ср	6	10	
	Раздел 5. 5. Корреляции «структура – свойство». Топологический подход				
5.1		Лек	6	6	
5.2		Лаб	6	12	
5.3		Ср	6	10	
	Раздел 6. 6. Перечисление изомеров. теорема Пойа				
6.1		Лек	6	4	
6.2		Лаб	6	8	
6.3		Ср	6	7	
	Раздел 7. 7. Контроль				
7.1		Экзамен	6	27	

Образовательные технологии

Для реализации ООП и повышения качества образовательного процесса используются следующие образовательные технологии:

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)

Рекомендуемая литература

Основная

Шифр	Литература
Л.1.1	Клинов А. В., Мухаметзянова А. Г., Математическое моделирование химико-технологических процессов, Казань: Казанский государственный технологический университет, 2009, ISBN: 978-5-7882-0774-2, URL: https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=270540
Л.1.2	Клековкин, Коннова, Коннов, Геометрическая теория графов, Москва: Юрайт, 2021, ISBN: 978-5-534-04812-4, URL: https://urait.ru/bcode/472746
Л.1.3	Виноградова, Папулов, Теоретико-графовый подход в изучении корреляций структура-свойство алкинов, Тверь: Тверской государственный университет, 2014, ISBN: , URL: http://eprints.tversu.ru/4722/

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

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.