

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич
Должность: врио ректора
Дата подписания: 25.03.2025 16:40:48
Уникальный программный ключ:
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

24 апреля 2024 г.



Пахомов Павел Михайлович

Рабочая программа дисциплины

Математические модели в корреляциях "структура-свойство"

Закреплена за кафедрой: **Физической химии**

Направление подготовки: **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия**

Направленность (профиль): **Экспертная и медицинская химия: теория и практика.**

Квалификация: **Химик. Преподаватель химии**

Форма обучения: **очная**

Семестр: **9**

Программу составил(и):

канд. хим. наук, доц., Белоцерковец Нина Ивановна

Тверь, 2024

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели освоения дисциплины (модуля):

Цель дисциплины – дать студентам углубленное представление об основных принципах математического моделирования «структура-свойство» химических веществ.

Данная дисциплина продолжает и углубляет тематику дисциплины специализации «Математические модели в физической химии». Предмет дисциплины составляют молекулярные математические модели в тех областях физической химии, которые связаны с исследованием взаимосвязи свойств и строения химических соединений – одним из научных направлений кафедры физической химии ТвГУ.

Задачи:

Задачи дисциплины – научить студентов строить математические модели и применять их для решения ряда конкретных проблем молекулярного моделирования (построение расчетных схем, расчет и прогнозирование физико-химических свойств веществ).

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ОП: Б1.В

Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Физические методы исследования

Физическая химия

Методика научного исследования

Математика

Информатика

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

Научно-исследовательская работа

Преддипломная практика

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость	6 ЗЕТ
Часов по учебному плану	216
в том числе:	
аудиторные занятия	69
самостоятельная работа	40
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 техно-логии)

5. ВИДЫ КОНТРОЛЯ

Виды контроля в семестрах:	
экзамены	9

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. Основные представления о методологии определения количественных соотношений структура-свойство: основные понятия					
1.1	Основные понятия методологии определения количественных соотношений структура-свойство:	Лек	9	2		
1.2	Этапы методологии КССС (QSPA)	Лаб	9	2		
1.3	Конспект учебного пособия по теме	Ср	9	2		
	Раздел 2. 2. Корреляционный анализ. Способы оценки силы связи между переменными величинами. Коэффициент корреляции, его значения и способы расчета. Коэффициент детерминации					
2.1	Корреляционный анализ. Способы оценки силы связи между переменными величинами. Коэффициент корреляции, его значения и способы расчета.	Лек	9	2		
2.2	Определение коэффициента корреляции	Лаб	9	6		
2.3	Использование коэффициента корреляции на практике. Коэффициент детерминации и границы его применения.	Ср	9	5		
	Раздел 3. 3. Линейная модель зависимости переменных величин. Способы проверки соблюдения линейной зависимости между величинами. Аналитический критерий соблюдения линейной зависимости между величинами. Метод выбранных точек. Метод средних					

3.1	Характеристика линейной модели корреляции переменных величин	Лек	9	2		
3.2	Аналитический критерий соблюдения линейной зависимости между величинами. Метод выбранных точек. Метод средних	Лаб	9	4		
3.3	Конспект учебного пособия по теме занятий	Ср	9	4		
	Раздел 4. 4. Основные математические модели (уравнения) нелинейной взаимосвязи двух переменных величин. Графический способ нахождения эмпирической формулы зависимости между двумя наборами величин. Правила построения графика. Понятия графической интерполяции и экстраполяции. Правила работы с графическим редактором программы Origin.					
4.1	Основные математические модели (уравнения) нелинейной взаимосвязи двух переменных величин	Лек	9	2		
4.2	Графический способ нахождения эмпирической формулы зависимости между двумя наборами величин. Правила построения графика. Понятия графической интерполяции и экстраполяции.	Лаб	9	6		
4.3	Правила построения графика. Понятия графической интерполяции и экстраполяции. Правила работы с графическим редактором программы Origin.	Ср	9	6		
	Раздел 5. 5. Вычисление констант эмпирического уравнения аналитическим и графическим способом					
5.1	Виды эмпирических уравнений, их параметры и способы их определения	Лек	9	2		

5.2	Определение параметров линейного уравнения аналитическим способом. Определение параметров линейного уравнения графическим способом. Параметры нелинейного уравнения	Лаб	9	8		
5.3	Анализ литературных данных и оформление конспектов по темам занятий	Ср	9	3		
	Раздел 6. 6. Представления о методе наименьших квадратов (МНК) при вычислении констант эмпирического уравнения. Сущность МНК при расчете констант уравнения линейной зависимости между величинами, формулы расчета. Способы оценки погрешности расчета констант уравнения с помощью МНК					
6.1	Представления о методе наименьших квадратов (МНК) при вычислении констант эмпирического уравнения.	Лек	9	2		
6.2	Сущность МНК при расчете констант уравнения линейной зависимости между величинами, формулы расчета. Способы оценки погрешности расчета констант уравнения с помощью МНК.	Лаб	9	6		
6.3	Конспект учебного пособия по темам занятий. Оформление отчетов	Ср	9	2		
	Раздел 7. 7. Модели химической структуры и способы их описания. Дескрипторы химической структуры, их классификация. Топологические индексы. Индекс Винера. Индекс Рандича.					
7.1	Модели химической структуры и способы их описания. Дескрипторы химической структуры, их классификация.	Лек	9	2		
7.2	Характеристика топологических индексов Индекс Винера и правила его расчета. Индекс Рандича и его применение.	Лаб	9	6		
7.3	Конспекты учебного пособия и оформление отчета	Ср	9	6		

	Раздел 8. 8. Применение методологии QSPR: этапы поиска корреляционного уравнения «структура-свойство» и оценки его качества. Прогнозирование свойств неизвестных химических соединений					
8.1	Основные представления о методологии QSPR: понятия, этапы поиска корреляционного уравнения «структура-свойство»	Лек	9	3		
8.2	Формирование таблицы данных исследуемого ряда соединений Расчет дескрипторов структуры выбранного ряда соединений. Поиск корреляционного уравнения на тренировочной наборе соединений. Проверка качества корреляционного уравнения на тестовом наборе соединений. Оценка качества прогноза свойств.	Лаб	9	14		
8.3	Конспект учебного пособия по темам занятий. Оформление отчетов	Ср	9	12		
	Раздел 9. 9. Контроль					
9.1	Экзамен	Экзамен	9	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

Рейтинг-контроль по дисциплине включает текущий (аудиторные занятия,

самостоятельная работа) и итоговый контроль (экзамен).

Текущий контроль (60 баллов):

Модуль 1 (рейтинг-контроль)

Лабораторная работа (10 баллов)

Выполнение практической задачи –3 балла

Объяснение теоретических основ данной работы – 3 балла

Собеседование по одному из заданий для самостоятельной работы -2 балла

Премияльные баллы за качество и творческий подход при выполнении работы – 2 балла

Всего: 4 работы – 40 баллов.

Модуль 2 (рейтинг-контроль)

Лабораторная работа (10 баллов)

Выполнение практической задачи –3 балла

Объяснение теоретических основ данной работы – 3 балла

Собеседование по одному из заданий для самостоятельной работы -2 балла

Премияльные баллы за качество и творческий подход при выполнении работы – 2 балла

Всего: 2 работы – 20 баллов.

Итоговый контроль (40 баллов):

Экзамен – конспект, собеседование и упражнение - 40 баллов

Итого за семестр: 100 баллов

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

9.1. Рекомендуемая литература

9.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"

Э1	Лейцин В.Н. Моделирование связанных процессов в реагирующих средах [Электронный ресурс]: монография/ Лейцин В.Н., Дмитриева М.А.— Электрон. текстовые данные.— Калининград: Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта, 2012.— 241 с.— Режим доступа: http://www.iprbookshop.ru/23805 :
----	---

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	VLC media player
7	Foxit Reader
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»

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Аудит-я	Оборудование
3-243	комплект учебной мебели, компьютеры

11. МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

На лабораторных занятиях проводятся коллективная и индивидуальная работа по усвоению тем учебной программы дисциплины, а также небольшие контрольные работы (из 1-2 вопросов). Результаты работ учитываются при рейтинг-контроле.

Некоторые из вопросов учебной программы выносятся на самостоятельную работу, когда студент готовит конспект по заданной теме и выполняет индивидуальное задание.

По дисциплине «Математические модели в корреляциях «структура - свойство»» учебным планом предусмотрен экзамен, который включает в себя результаты рейтинг-контроля и письменный ответ на вопросы (с устными пояснениями при необходимости). При ответе на вопросы принимается во внимание знание и понимание по существу учебного материала, полнота и глубина освещения, аргументированность и грамотность ответа.

Рекомендации для 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.

Помимо аудиторных занятий рекомендуется самостоятельно проработать ряд тем дисциплины по учебнику, сделать конспекты важнейших понятий и методов исследования

ПРИЛОЖЕНИЕ 1.

Дисциплина: «Математические модели в корреляциях структура-свойство»

**Оценочные материалы
для проведения текущей и промежуточной аттестации**

Вопросы для текущего контроля

1. Что такое молекулярная модель?
2. Раскройте основные этапы математического моделирования.
3. Назовите основные этапы методологии QSPR для установления количественных корреляций между структурой и свойствами химических соединений.
4. Как оценивается качество корреляционных уравнений?
5. Что такое коэффициент корреляции?
6. Сформулируйте и запишите в виде математического выражения линейную модель связи свойств веществ со строением молекул.
7. Как определяются параметры модельного корреляционного уравнения?
8. Опишите процедуру МНК.
9. Сопоставьте результаты расчета с экспериментом. Найдите среднюю абсолютную ошибку расчета и среднеквадратичное отклонение.
10. Дайте понятие дескриптора химической структуры и охарактеризуйте различные типы дескрипторов (геометрические, топологические, электронные).
11. Объясните правила расчета топологических индексов на основе матрицы связности и матрицы расстояний (индекс Винера, индекс Рандича и другие).

Контроль самостоятельной работы

Контроль самостоятельной работы проводится в различных формах:

- фронтальный опрос,
- письменное задание,
- устное выступление по заданной теме и др.

Примеры письменных заданий по самостоятельной работе:

Формулировка задания	Вид работы / способ
<p>1. Последовательно ответить на все вопросы. При этом основное внимание следует уделить: Осмыслению терминов и понятий по теме занятия Основным закономерностям вычислений Последовательности действий при расчетах Расчетным формулам (<i>расшифровать обозначения, указать единицы измерения</i>)</p>	Конспект/Письменная работа
<p>2. В соответствии с текстом учебного пособия освоить методику расчета коэффициента корреляции: Рассчитать коэффициент корреляции для своего варианта экспериментальных данных Записать результаты в отчет</p>	Конспект/Письменная работа
<p>3. С помощью программы Origin построить точечный график зависимости поверхностного натяжения от логарифма концентрации раствора для своего варианта. Провести линейное сглаживание данных (Инструменты: Analysis - Fit Linear) Из таблицы результатов найти значение коэффициента корреляции R (<i>программа дает значение коэффициента детерминации R-Square</i>). Сравнить рассчитанные в работах 2, 3 значения коэффициента корреляции и сделать выводы о существовании линейной корреляционной зависимости между поверхностным натяжением и концентрацией раствора</p>	Конспект/Письменная работа

<p>Найти в учебном пособии ответы на вопросы и внести их в отчет по работе:</p> <p>Аналитический вид линейной зависимости.</p> <p>Почему при графической обработке данных стремятся получить линейную зависимость?</p> <p>В чем состоит задача обработки экспериментально полученной графической зависимости?</p> <p>Чего достигают, подбирая значения параметров теоретической зависимости?</p> <p>О чем может свидетельствовать расхождение между экспериментальной и теоретической зависимостью?</p>	Конспект/Письменная работа
---	----------------------------

Требования к рейтинг-контролю

Рейтинг-контроль по дисциплине включает **текущий** (аудиторные занятия, самостоятельная работа) и **итоговый** контроль (экзамен).

Текущий контроль (60 баллов):

Модуль 1 (рейтинг-контроль)

Лабораторная работа (10 баллов)

Выполнение практической задачи – 3 балла

Объяснение теоретических основ данной работы – 3 балла

Собеседование по одному из заданий для самостоятельной работы - 2 балла

Премияльные баллы за качество и творческий подход при выполнении работы – 2 балла

Всего: 4 работы – 40 баллов.

Модуль 2 (рейтинг-контроль)

Лабораторная работа (10 баллов)

Выполнение практической задачи – 3 балла

Объяснение теоретических основ данной работы – 3 балла

Собеседование по одному из заданий для самостоятельной работы - 2 балла

Премияльные баллы за качество и творческий подход при выполнении работы – 2 балла

Всего: 2 работы – 20 баллов.

Итоговый контроль (40 баллов):

Экзамен – конспект, собеседование и упражнение - 40 баллов

Итого за семестр: 100 баллов

ТИПОВЫЕ КОНТРОЛЬНЫЕ ЗАДАНИЯ ДЛЯ ПРОМЕЖУТОЧНОГО (ИТОГОВОГО) КОНТРОЛЯ

Планируемый образовательный результат (индикатор)	Формулировка задания	Вид работы / способ	Критерии оценивания
ПК-1.1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР (5 баллов)	<p>1. Перечислите этапы методологии QSPR</p> <p>2. Составьте алгоритм действий при графическом способе определения параметров линейной зависимости между строением и</p>	Конспект/Письменная работа	<p>Дан полный правильный ответ – 5 балла;</p> <p>Дан правильный ответ, но допущены незначительные ошибки, не искажающие общего смысла – 4 балла; •</p> <p>Дан правильный ответ</p>

	свойством ряда веществ.		только для части задания– 3 балл.
ПК-1.2 Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР (10 баллов)	<p>1. С помощью программы Origin графическую зависимость свойства ряда химических соединений от топологического индекса Винера.</p> <p>2. Дайте оценку полученной математической модели на основании общепринятых статистических критериев.</p>	Творческое задание/Письменно	Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 10 баллов ; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла– 8 балла; Имеется верное решение только части задания– 5 балл.
ПК-1.3 Готовит объекты исследования (5 баллов)	<p>1. Составьте молекулярный граф по структурной формуле соединения</p> <p>2. Сформулируйте правила расчета индекса Винера для заданного углеводорода.</p> <p>3. С помощью номограммы определите значение температуры кипения соединения при атмосферном давлении по значению температуры кипения в вакууме.</p>	Письменная работа	Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 5 баллов ; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла– 4 балла; Имеется верное решение только части задания– 3 балл.
ПК-2.1 Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных) (10 баллов)	<p>1. С помощью поисковой системы найдите и систематизируйте литературные данные по свойствам заданной группы химических веществ.</p> <p>2. Постройте классификацию дескрипторов химической структуры</p>	Творческое задание/письменно	Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 10 баллов ; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла– 8 балла; Имеется верное решение только части задания– 5 балл.
ПК-2.2 Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии) (10 баллов)	<p>1. Сделайте анализ предоставленного научного текста. Назовите основные части, охарактеризуйте использованные методы исследования, обобщите результаты исследования</p> <p>2. Сравните достоинства и недостатки различных типов дескрипторов химической структуры (геометрических,</p>	Творческое задание/письменно	Дан полный правильный ответ – 10 баллов ; Дан правильный ответ, но допущены несущественные ошибки, не искажающие общего смысла– 8 балла; • Дан правильный ответ только для части задания– 5

	топологических, электронных).		
ВСЕГО:			40 баллов

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ (ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ)

для проведения диагностической работы в рамках аккредитационных показателей по образовательным программам высшего образования по дисциплине 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.
Химия функциональных материалов

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
ПК-1.1. Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР			
<i>Задания закрытого типа</i>			
1	Б	<p><i>Выбрать один правильный ответ:</i></p> <p>1. С чего начинают исследование корреляции между структурой и свойством соединений по методологии QSPR (количественное соотношение структура-свойство):</p> <p><i>А. Расчет параметров структуры</i> <i>Б. Составление базы экспериментальных данных по свойствам исследуемых соединений</i> <i>В. Расчет ошибки прогнозирования свойства</i> <i>Г. Проверка корреляционного уравнения на тестовом наборе соединений</i> <i>Д. Поиск корреляционного уравнения структура-свойство для тренировочного набора соединений</i></p>	1 балл - правильно
2	Б	<p><i>Выбрать один правильный ответ:</i></p> <p>1. Последним этапом исследование корреляции между структурой и свойством соединений по методологии QSPR (количественное соотношение структура-свойство) является:</p> <p><i>А. Составление базы экспериментальных данных по свойствам исследуемых соединений</i> <i>Б. Расчет ошибки прогнозирования и</i></p>	1 балл - правильно

		<p><i>оценка силы прогноза</i></p> <p><i>В. Расчет параметров структуры</i></p> <p><i>Г. Проверка корреляционного уравнения на тестовом наборе соединений</i></p> <p><i>Д. Поиск корреляционного уравнения структура-свойство для тренировочного набора соединений</i></p>	
3	Б-А-Д-Г-В	<p>Выбрать правильную последовательность действий при исследовании взаимосвязи между структурой и свойствами соединений по методологии QSPR (количественное соотношение структура-свойство):</p> <p><i>А. Расчет параметров структуры</i></p> <p><i>Б. Составление базы экспериментальных данных по свойствам соединений</i></p> <p><i>В. Расчет ошибки прогнозирования</i></p> <p><i>Г. Проверка корреляционного уравнения на тестовом наборе соединений</i></p> <p><i>Д. Поиск корреляционного уравнения структура-свойство для тренировочного набора соединений</i></p>	<p>3 балла- правильно;</p> <p>2 балла – одна ошибка;</p> <p>1 балл – две ошибки;</p> <p>0 баллов - три и более ошибок.</p>
4	А, Г	<p><i>Выбрать все правильные ответы:</i></p> <p>Какие данные о свойствах веществ используют при поиске количественных корреляций между структурой и свойствами химических соединений:</p> <p><i>А. Экспериментальные собственные</i></p> <p><i>Б. Теоретические собственные</i></p> <p><i>В. Теоретические литературные</i></p> <p><i>Г. Экспериментальные литературные</i></p>	<p>2 балла – выбраны и А, и Г</p> <p>1 балл- выбраны либо А, либо Г</p>
5	В	<p><i>Выбрать один правильный ответ:</i></p> <p>С помощью какой компьютерной программы можно графическим методом определить параметры корреляционного уравнения, связывающего две переменные величины:</p> <p><i>А. Microsoft Office Word</i></p> <p><i>Б. Paint</i></p> <p><i>В. Origin</i></p> <p><i>Г. Microsoft Office PowerPoint</i></p>	1 балл - правильно
Задания открытого типа			
6		<p><i>Вставить пропущенное слово:</i></p> <p>Обработку результатов измерений нужно начинать с проверки наличия _____ (каких?) _____ ошибок.</p> <p>_____</p> <p><i>Правильный ответ (ключ):</i></p> <p>«грубых» (или «промахов»)</p>	1 балл – правильно
7		<p><i>Вставить пропущенное слово:</i></p> <p>Для расчета индекса Винера необходимо построить матрицу _____ (какую?) химического графа соединения.</p> <p>_____</p> <p><i>Правильный ответ (ключ):</i></p> <p>«расстояний».</p>	1 балл – правильно

8	<p><i>Вставить пропущенное слово:</i></p> <p>Для поиска корреляционного уравнения между структурой и свойством соединений по методологии QSPR (количественное соотношение структура-свойство) используют экспериментальные данные по свойствам соединений _____ (какого?) набора?</p> <p>_____</p> <p><i>Правильный ответ (ключ):</i> «тренировочного»</p>	1 балл – правильно
9	<p>Какие параметры (характеристики) молекулы могут служить дескрипторами их структуры (<i>привести 3 примера</i>)?</p> <p>_____</p> <p><i>Правильный ответ (ключ):</i> Число атомов в молекуле, молекулярная масса и др.; геометрические свойства (длина связи, валентный угол и др.); топологические индексы (индекс Винера и др.), электронные параметры (электронная плотность и др.)</p>	3 балла - три примера; 2 балла - два примера; 1 балл – один пример;
10	<p>Какие компьютерные программы обычно используют для построения графиков?</p> <p>_____</p> <p><i>Правильный ответ (ключ):</i> Программы Origin (или Excel, или другие графические редакторы)</p>	2 балла - два названия 1 балл – одно название

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

Задания закрытого типа

11	Б	<p><i>Выбрать один правильный ответ:</i></p> <p>Для первичной статистической обработки результатов измерений можно использовать аппаратуру:</p> <p>А. Фотокolorиметр. Б. Персональный компьютер В. Рефрактометр. Г. Спектрофотометр.</p>	1 балл - правильно
12	Г	<p><i>Выбрать один правильный ответ:</i></p> <p>Графические методы физико-химических расчетов требуют использования следующего вида компьютерной программы:</p> <p>А. Программа-архиватор Б. Текстовый редактор В. Диспетчер рисунков Г. Графический редактор</p>	1 балл - правильно
13	Г	<p><i>Выбрать один правильный ответ:</i></p> <p>Каким методом оценивают параметры эмпирической формулы линейной зависимости (регрессии):</p> <p>А. Метод проб и ошибок Б. Метод экстраполяции В. Метод молекулярных орбиталей Г. Метод наименьших квадратов</p>	1 балл - правильно

14	В	<p><i>Выбрать один правильный ответ:</i></p> <p>Какое значение коэффициента корреляции r_{xy} однозначно говорит о том, что две переменные величины x и y независимы:</p> <p>А. $r_{xy} = 1$. Б. $r_{xy} = 0.5$. В. $r_{xy} = 0$. Г. $r_{xy} = -1$.</p>	1 балл - правильно
15	Да	Нужно ли значения экспериментальных данных, используемых при поиске количественных корреляций «структура-свойство» химических соединений приводить к одинаковым условиям измерения? (Да или нет?)	1 балл - правильно
Задания открытого типа			
16		<p><i>Вставить пропущенное слово:</i></p> <p>Грубые ошибки измерений могут быть обусловлены неправильной работой используемого _____ (чего?) _____.</p> <p>_____</p> <p><i>Правильный ответ (ключ):</i> «прибора» или «устройства» и т.п.</p>	1 балл - правильно
17		<p>Среднее арифметическое \bar{x} результатов x_i серии из нескольких (n) измерений физической величины рассчитывают по формуле _____ (формула).</p> <p>_____</p> <p><i>Правильный ответ (ключ):</i> $\bar{x} = \frac{\sum x_i}{n}$; или $x_{cp} = (x_1 + x_2 + \dots + x_n) / n$</p>	1 балл – правильно:
18		<p>Проверку качества корреляционного уравнения взаимосвязи «структура-свойство», найденного на тренировочном наборе исследуемых соединений, проводят на _____ (каком?) _____ наборе соединений.</p> <p>_____</p> <p><i>Правильный ответ (ключ):</i> «тестовом» (или «на другом»)</p>	1 балл – правильно
19		<p>Математическая модель (уравнение) линейной зависимости между двумя переменными величинами имеет вид _____ (формула).</p> <p>_____</p> <p><i>Правильный ответ (ключ):</i> $y = a + bx$ или $y = ax + b$</p>	2 балла – правильно 1 балл – близкий по смыслу вариант
20		<p><i>Вставить пропущенное слово:</i></p> <p>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 каждый из правильных ответов

ПК 1.3. Готовит объекты исследования

Задания закрытого типа

21	С	<p><i>Выбрать один правильный ответ:</i> Топологический индекс Винера (W) химического соединения определяется как полусумма всех элементов матрицы расстояния: А. структурной формулы Б. брутто-формулы С. химического графа Д. молекулы.</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	Да	<p><i>Ответьте на вопрос:</i> Математической моделью корреляции «структура-свойство» является корреляционное (эмпирическое) уравнение. Да или нет?</p>	1 балл - правильно
24	Верно (Да)	<p>Верно ли утверждение: «Случайная погрешность присутствует во всех результатах измерений»?</p>	1 балл - правильно
25	Да	<p>Нужно ли строить химический граф исследуемого соединения для расчета топологических структурных параметров (индексов)? Да или нет?</p>	1 балл - правильно

Задания открытого типа

26	<p>Как можно уменьшить значение случайной погрешности результатов измерения образца?</p> <p>_____</p> <p><i>Правильный ответ (ключ):</i> Увеличить число измерений данного образца.</p>		1 балл - правильно
27	<p>Назовите химическое соединение, химический граф которого имеет вид:</p> <p style="text-align: center;">: • - • = • ?</p> <p>_____</p> <p><i>Правильный ответ (ключ):</i> «пропен» или «пропилен»</p>		1 балл - правильно
28	<p>При поиске графическим способом корреляционного уравнения взаимосвязи между структурой и свойством соединений на оси абсцисс (ось X) откладывают значения свойства или структурного параметра?</p> <p>_____</p> <p><i>Правильный ответ (ключ):</i> Структурного параметра (или «индекса», или «дескриптора»)</p>		1 балла – правильно

29	<p>Определите по данным таблицы значение коэффициента Стьюдента (t) для серии из 4-х измерений для доверительной вероятности 0.95:</p> <p>Коэффициенты Стьюдента $t(\alpha, n)$ для доверительной вероятности α и количества измерений n</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th rowspan="2">n</th> <th colspan="2">Доверительная вероятность α</th> </tr> <tr> <th>0.68</th> <th>0.95</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>2</td> <td>2,0</td> <td>12,7</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>1,4</td> <td>4,3</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>1,3</td> <td>3,2</td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>1,2</td> <td>2,8</td> </tr> <tr> <td>6</td> <td>1,2</td> <td>2,6</td> </tr> </tbody> </table> <p>Правильный ответ (ключ): Значение $t=3.2$</p>	n	Доверительная вероятность α		0.68	0.95	2	2,0	12,7	3	1,4	4,3	4	1,3	3,2	5	1,2	2,8	6	1,2	2,6	1 балл - правильно
n	Доверительная вероятность α																					
	0.68	0.95																				
2	2,0	12,7																				
3	1,4	4,3																				
4	1,3	3,2																				
5	1,2	2,8																				
6	1,2	2,6																				
30	<p>С помощью какой компьютерной программы можно найти корреляционное уравнение взаимосвязи между структурой и свойством исследуемых соединений?</p> <p>Правильный ответ (ключ): «графический редактор» или «Origin»</p>	1 балл - правильно																				

ПК-2 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы

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)

Номер задания	Правильный ответ (ключ)	Содержание вопроса/задания	Критерии оценивания заданий
ПК-2.1 Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных)			
<i>Задания закрытого типа</i>			
1	А, В, Г	<p>Выбрать все правильные ответы:</p> <p>Надежными источниками химической информации являются:</p> <p>А. химические справочники</p> <p>Б. социальные сети</p> <p>В. химические издания (книги, статьи и т.п.)</p> <p>Г. сайты ведущих вузов и библиотек</p>	<p>3 балла – А, В, Г</p> <p>2 балла – АВ, или АГ, или ВГ</p> <p>1 балл – А, или В, или Г</p>
2	Г	<p>Выбрать один правильный ответ:</p> <p>В каком документе закрепляется право на новое вещество, новый способ:</p> <p>А. научная статья</p>	1 балл - правильно

		Б. учебник В. сборник статей Г. патент	
3	Да	Является ли «Справочник химика» источником надежной химической информации? <i>Да или нет?</i>	1 балл - правильно
4	Да	Верно ли, что во Всероссийской патентно-технической библиотеке имеются патентные базы данных? <i>Да или нет?</i>	1 балл - правильно
5	Да	Правильно ли утверждение, что для поиска химической информации необходимо использовать только надежные литературные источники? <i>Да или нет?</i>	1 балл - правильно
Задания открытого типа			
6	<p><i>Вставьте пропущенное слово:</i> При литературном поиске данных о температуре кипения алканов в качестве ключевых слов нужно использовать слова: « ___ » и «температура кипения».</p> <p>_____</p> <p><i>Правильный ответ (ключ):</i> «алканы»</p>		1 балл - правильно
7	<p>Назовите соединение, структурная формула которого имеет вид: $\text{CH}_3\text{-CH=CH=CH}_3$.</p> <p>_____</p> <p><i>Правильный ответ (ключ):</i> Бутен-2 (или 2-бутен, или 2-бутилен)</p>		1 балл - правильно
8	<p>Запишите структурную формулу 1-бутанола.</p> <p>_____</p> <p><i>Правильный ответ (ключ):</i> $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$ (или $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$)</p>		1 балл - правильно
9	<p>В каких единицах принято выражать значение плотности жидкости в химической литературе?</p> <p>_____</p> <p><i>Правильный ответ (ключ):</i> г/мл, или г/см^3 ($\text{г}\cdot\text{см}^{-3}$), или кг/м^3 ($\text{кг}\cdot\text{м}^{-3}$)</p>		1 балл - правильно
10	<p>Назовите два вида номенклатуры, наиболее часто используемых для названий органических соединений</p> <p>_____</p> <p><i>Правильный ответ (ключ):</i> Систематическая (или правила ИЮПАК) и тривиальная номенклатуры,</p>		2 балла – два названия 1 балл – одно название
ПК-2.2 Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)			
Задания закрытого типа			

11	Да	Можно ли найти в «Справочнике химика» данные по температуре кипения органических веществ? <i>Да или нет?</i>	1 балл - правильно
12	В, Г	<i>Выбрать все варианты:</i> Что НЕ относится к тематике «Спектроскопия»?: А. ядерный магнитный резонанс (ЯМР) Б. УФ-спектроскопия В. хроматография Г. полярография	2 балла – два варианта В, Г 1 балл – один вариант В или Г
13	В	<i>Выбрать один правильный ответ:</i> Какое соединение является неполярным?: А. аммиак Б. вода В. метан Г. этанол	1 балл - правильно
14	Нет	Правильно ли утверждать, что все спирты хорошо растворимы в воде? <i>(Да или нет?)</i>	1 балл - правильно
15	Б	<i>Выбрать один правильный ответ:</i> С помощью какого прибора измеряют показатель преломления?: А. термометр Б. рефрактометр В. пикнометр Г. вискозиметр.	1 балл - правильно
Задания открытого типа			
16	При оформлении результатов литературного поиска данных по теме исследования необходимо делать ссылки на ___ (что?) ___ информации <i>Правильный ответ (ключ):</i> «источник», «литературный источник», «автор», «статья», «книга», «справочник» и т.п.		1 балл - правильно
17	Анализ является важным общенаучным _____ (чем?) научного познания. <i>Правильный ответ (ключ):</i> Методом (или способом)		1 балл - правильно
18	Обобщение - это важный общенаучный _____ (что?) научного познания. <i>Правильный ответ (ключ):</i> метод,(или способ)		1 балл - правильно
19	Запишите общую брутто-формулу алкенов. <i>Правильный ответ (ключ):</i> C _n H _{2n}		1 балл - правильно
20	Какую общую функциональную группу содержат соединения класса спиртов? _____ <i>Правильный ответ (ключ):</i> «гидроксильную» (или «гидроксил», -ОН)		1 балл - правильно

