

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич
Должность: врио ректора
Дата подписания: 26.03.2025 10:13:16
Уникальный программный ключ:
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»



Утверждаю:

Проректор по ОДиМП

«2» сентября 2024 г.

Рабочая программа факультативной дисциплины (с аннотацией)

«Математическое моделирование в физической химии»

для обучающихся программы аспирантуры

1.4.4. Физическая химия

Составитель:

Д.ф.-м.н., профессор Виноградова М.Г.

Тверь, 2024

I. Аннотация

1. Цель и задачи дисциплины

Цель и задачи дисциплины . ознакомить аспирантов с основными идеями и методами математического моделирования и их применением в физической химии.

Задачи дисциплины

1. раскрыть основные принципы математического моделирования;
2. научить аспирантов применять полученные знания для решения конкретных проблем химии;
3. повысить уровень профессиональной компетентности аспирантов посредством установления системы межпредметных связей содержания курса с содержанием профилирующих дисциплин.

2. Место дисциплины в структуре ПА

Дисциплина является факультативной для подготовки аспирантов в области физической химии. Дисциплина непосредственно связана с дисциплинами «Физическая химия», «Симметрия молекул и кристаллов».

3. Объем дисциплины: 4 зачетные единицы, 144 академических часа, в том числе:

контактная аудиторная работа:

лекции – 6 часов, практические занятия – 6 часов;

самостоятельная работа:

132 часа

4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения программы аспирантуры

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)
ОПК-2 обладать готовностью организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук
УК-5 обладать способностью планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития
ПК-1 способность подбора инструментальной базы для решения научных, научно-прикладных

5. Форма промежуточной аттестации и семестр прохождения зачёт.

6. Язык преподавания русский.

II. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

Учебная программа – наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)		Самостоятельная работа (час.)
		Лекции	Практические (лабораторные) занятия	
Математическое моделирование	21	1		20
Внутримолекулярные взаимодействия	58	1	2	55
Атом-атомное представление	36	2	2	32
Построение расчетных схем и их применение	29	2	2	25
ИТОГО	144	6	6	132

III. Образовательные технологии

Учебная программа – наименование разделов и тем	Вид занятия	Образовательные технологии
Математическое моделирование	Лекция, практическое	Лекционные занятия с мультимедийными презентациями
Внутримолекулярные взаимодействия		
Атом-атомное представление		

Построение расчетных схем и их применение		тациями. Практические занятия с анализом спектральных данных и моделированием колебательных процессов. Выполнение самостоятельных исследовательских проектов по актуальным вопросам дисциплины. Обсуждение современных научных публикаций на семинарах.
---	--	--

IV. Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации

Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции ОПК-2 обладать готовностью организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук

Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков (2-3 примера)	Показатели и критерии оценивания компетенции, шкала оценивания
Кейс: 1. Химическая топология изучает : <i>а)</i> Молекулы с разной геометрической конфигурацией <i>б)</i> Молекулы, отличающиеся типом химических связей <i>в)</i> Катенаны, ротаксаны, узлы, молекулярные ленты Мёбиуса и другие такого рода образования.	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. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3

2. Какие взаимодействия встречаются в молекуле этана (в шахматной конформации)? 1. Валентные, невалентные через один и через два атома (<i>транс-, гош-</i>). 2. Валентные, невалентные через один и через два атома (<i>транс-, цис-</i>). 3. Валентные, невалентные через один и через два (<i>цис-, анти-</i>). 3. Что такое стереохимическая конфигурация? 1. Определенное расположение атомов около хиральных центров (или других диссимметричных частей) молекулы. 2. Пространственное строение молекулы. 3. Равновесная конфигурация ядерного скелета.	балла – «5»
Составьте схемы расчёта свойств X-замещённых метана и его аналогов при учете парных взаимодействий атомов. Установите число параметров схем. Оцените предсказательные возможности теории.	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. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3

	балла – «5»
1. К структурной изомерии относятся: а) оптическая изомерия; б) изомерия скелета; в) геометрическая изомерия; г) поворотная изомерия. 2. Что такое химическое строение? 1. Порядок (последовательность и кратность) связи атомов в молекуле. 2. Расположение атомов в пространстве. 3. Конфигурация молекулы. 3. Пространственные изомеры (стереоизомеры) образуют: 1. Молекулы, имеющие одинаковый состав, одинаковое химическое, но разное пространственное строение. 2. Молекулы с одинаковой геометрической конфигурацией (например, все тетраэдрические молекулы). 3. Оптические активные соединения.	Правильно выбран вариант ответа – 1 балл Тест из 3 заданий: 1 балл – «3» , 2 балла – «4» , 3 балла – «5»

Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции УК-5 обладать способностью планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития

Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навы-	Показатели и критерии оценивания компетенции,
---	--

ков (2-3 примера)	шкала оценивания
Кейс: 1. Сколько парных взаимодействий (среди них валентных и невалентных) в молекуле метана? 1. 4 ($= 4\text{сн}_0 + 6\text{нн}_1$). 2. 6 ($= 4\text{сн}_0 + 2\text{нн}_1$). 3. 10 ($= 4\text{сн}_0 + 10\text{нн}_1$). 2. Какие взаимодействия встречаются в молекуле этана (в шахматной конформации)? 1. Валентные, невалентные через один и через два атома (<i>транс-, гош-</i>). 2. Валентные, невалентные через один и через два атома (<i>транс-, цис-</i>). 3. Валентные, невалентные через один и через два (<i>цис-, анти-</i>). 3. Что такое стереохимическая конфигурация? 1. Определенное расположение атомов около хиральных центров (или других диссимметричных частей) молекулы. 2. Пространственное строение молекулы. 3. Равновесная конфигурация ядерного скелета.	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. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3 балла – «5»
Составьте схему расчёта свойств X-	Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ –

замещённых алкенов в третьем приближении	3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2 балла; • Имеется верное решение только части задания – 1 балл. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3 балла – «5»
Что такое математическая модель 1. Приближенное описание какого-либо объекта (явления, процесса) в терминах математики (вместе с граничными и начальными условиями). 2. Определенное математическое выражение, описывающее изучаемый процесс или явление. 3. Исходные предпосылки в постановке задачи. Общая погрешность решения задачи складывается из: 1. Погрешности математической модели; 2. Погрешности метода решения задачи, к которой приводит модель; 3. Погрешности математической модели + погрешности метода решения задачи, к которой приводит модель, + вычислительной погрешности. 3. Схема Фаянса для алканов имеет вид 1. $C_nH_{2n+2} = (n-1)pc-c + (2n+2)pc-n$.	Правильно выбран вариант ответа – 1 балл Тест из 3 заданий: 1 балл – «3» , 2 балла – «4» , 3 балла – «5»

2. $PC_nH_{2n+2} = (n-1)pc-c + (2n+2)pn$.	
3. $PC_nH_{2n+2} = (n)pc + (2n+2)pn$.	

Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции ПК-1 способность подбора инструментальной базы для решения научных, научно-прикладных задач

Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков (2-3 примера)	Показатели и критерии оценивания компетенции, шкала оценивания
1. При каких условиях свойство замещенных метана как квадратичная функция числа заместителей становится линейной функцией? 1. При учете только валентных взаимодействий. 2. При учете только парных валентных и невалентных взаимодействий. 3. Когда выполняется условие для невалентных взаимодействий: взаимодействие разнородных частиц равно полусумме взаимодействий однородных частиц (допущение о среднем арифметическом). 2. Топологические индексы –это: а) характеристики (инварианты) графа, не зависящие	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. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3 балла – «5»

от способа нумерации его вершин; б) подстановки, действующие на множестве вершин графа; в) подстановки на множестве вершин графа, сохраняющие смежность вершин. 3. В чем принципиальное отличие результатов получаемых методом молекулярной динамики и методом Монте-Карло 1. статические и динамические характеристики совпадают; 2. совпадают только динамические характеристики; 3. совпадают только статические характеристики; 4. в методе Монте-Карло нет времени	
Общая погрешность решения задачи складывается из: 1. Погрешности математической модели; 2. Погрешности метода решения задачи, к которой приводит модель; 3. Погрешности математической модели + погрешности метода решения задачи, к которой приводит модель, + вы-	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. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3 балла – «5»

числительной погрешности. 2. Коэффициент диффузии при моделировании методом молекулярной динамики может быть рассчитан из уравнения Эйнштейна-Смолохувского и как интеграл от автокорреляционной функции скорости. Почему обычно использую первый способ и как это реализуется.	
1. Наиболее распространённым программным продуктом для визуализации молекулярных структур является: – RasMol – Origin – HyperChem – MolMol 2. Укажите правильное основное предназначение программ из пакета MS Office (например а-2) а. Word б. Excel в. Access г. Power Point д. Outlook е. Publisher 5. настольная издательская система, предназначена для	Правильно выбран вариант ответа – 1 балл Тест из 3 заданий: 1 балл – «3» , 2 балла – «4» , 3 балла – «5»

создания профессионально оформленных публикаций; 6. система управления базами данных, предназначена для организации работы с большими объемами данных; 7. табличный процессор, предназначен для обработки табличных данных и выполнения сложных вычислений; 8. текстовый процессор, предназначен для создания и редактирования текстовых документов; 9. система подготовки электронных презентаций, предназначена для подготовки и проведения презентаций; 10. менеджер персональной информации, предназначен для обеспечения унифицированного доступа к корпоративной информации	
---	--

V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

1) Рекомендуемая литература

а) Основная литература:

1. Камышов В. М. Строение вещества / В. М. Камышов; Камышов В.М., Мирошникова Е.Г., Татауров В.П. - Москва : Лань, 2017. – Электронный ресурс. – Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/9000>

б) Дополнительная литература:

Луков, В.В. Физические методы исследования в химии : учебное пособие / В.В. Луков, И.Н. Щербаков. - Ростов на Дону : Издательство Южного федерального университета, 2016. - 216 с. : схем., табл., ил. - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-9275-2023-7 ; То же [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=461932>

Папулов Ю. Г. Строение молекул. Теория и методы расчета [Электронный ресурс] : [для студентов химических направлений и специальностей] / Папулов Юрий Григорьевич; ФГБОУ ВПО "Твер. гос. ун-т". - Тверь : Тверской государственный университет, 2013. - 1 электрон. опт. диск (CD-ROM) ; 12 см. - 100.00. Экз.: 2, из них: Фил3-2; Режим доступа: http://texts.lib.tversu.ru/texts/stroenie_molekul_teoriya_i_metody_rascheta_2013/Start.htm

1

Строение вещества. Строение кристаллов. – М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана (Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана), 2010. - "Рекомендовано Научно-методическим советом МГТУ им. Н.Э. Баумана в качестве учебного пособия". – Электронный ресурс. – Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=52473

2) Программное обеспечение

Google Chrome – бесплатное ПО.

Яндекс Браузер – бесплатное ПО.

Kaspersky Endpoint Security 10 – УПД № ПК 657 от 29.12.2023.

Многофункциональный редактор ONLYOFFICE – бесплатное ПО.

ОС Linux Ubuntu – бесплатное ПО.

3) Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

ЭБС Лань <https://e.lanbook.com/>

ЭБС Znanium.com <https://znanium.com/>

ЭБС Университетская библиотека online <https://biblioclub.ru>

ЭБС ЮРАЙТ <https://urait.ru/>

ЭБС IPR SMART <https://www.iprookshop.ru/>

ЭБС ТвГУ: <http://megapro.tversu.ru/megapro/Web>

Репозиторий ТвГУ: <http://eprints.tversu.ru>

VI. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины

Учебная программа

I. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Математическая модель как приближенное описание какого-либо объекта (явления, процесса) в терминах математики. Основные этапы математического моделирования.

II. ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Феноменологическая (физическая) модель: молекула как система взаимодействующих атомов. Парные взаимодействия и кратные. Валентные и невалентные взаимодействия. Виды взаимодействий в молекулах (по отдельным классам соединений): замещенные метана, этана и пропана (и их аналогов силана, моногермана, дисилана, метилсилана и т.д.), замещенные этилена, бензола, циклопропана, кубана и др.

Теоретико-графовый способ.

III. АТОМ-АТОМНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ

Основной постулат феноменологической теории связи свойств веществ со строением молекул: физико-химическое свойство как сумма свойств, приходящихся на отдельные взаимодействия атомов: одноцентровые, двухцентровые – парные, трехцентровые – тройные и т.д. (математическая модель).

IV. ПОСТРОЕНИЕ РАСЧЕТНЫХ СХЕМ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ

Методология построения схем расчета и прогнозирования.

Объекты исследования. Генерирование и систематизация изомеров на множестве выбранных объектов.

Вывод рабочих формул, удобных для расчета физико-химических свойств изучаемых соединений в разных приближениях.

Взаимосвязь между различными схемами расчета. Закономерности в параметрах схем. Оценка предсказательных возможностей теории.

Доведение расчетных схем “до числа”. Определение параметров схем. Метод средних и метод наименьших квадратов. Проведение численных расчетов свойств, сопоставление результатов расчета с экспериментом, получение расчетным путем новой (ранее недоступной) количественной информации.

Планы и методические указания по подготовке к практическим (семинарским) занятиям

Планы практических занятий и методические рекомендации по подготовке к ним разработаны в соответствии с программой дисциплины «Математическое моделирование в физической химии» и предназначены для проведения практических занятий и для самостоятельной подготовки аспирантов.

Практические занятия по дисциплине «Математическое моделирование в физической химии» являются одной из важнейших форм обучения и проводятся с целью углубления и закрепления знаний, привития навыков поиска, обобщения и изложения материала.

Семинарские занятия могут проводиться следующими методами: «дискуссии», «деловых игр», упражнения и др.

Конкретный метод проведения каждого семинарского занятия накануне определяет преподаватель.

1. Понятие математической модели. Основные этапы математического моделирования. Вычислительная математика. Вычислительные методы в физике и химии (6 часов).

2. Взаимодействия атомов. Валентные и невалентные взаимодействия. Виды взаимодействий: транс (t), гош (g), цис (c), транс-транс (tt), транс-гош (tg) и т.д.

Подсчеты взаимодействий в отдельных молекулах (метан, этан и пропан, этилен, бензол, циклопропан, кубан) (6 часов).

3. Основания феноменологических методов. Свойство вещества как сумма свойств, приходящихся на отдельные взаимодействия атомов (общая математическая модель): запись для разных молекул (8 часов).

4. Построение расчетных схем для замещенных метана и его аналогов, этана, пропана, этилена, бензола, циклопропана, кубана. Генерирование и систематизация изомеров (на базе теории перечисления Пойа). Вывод рабочих формул для расчета и предсказания физико-химических свойств изучаемых соединений в разных приближениях. Установление взаимо-связи между различными схемами. Предсказательные возможности.

5. Численные расчеты энтальпий образования, энтропий, энергий Гиббса, мольных объемов, теплот испарения и т.д. Сопоставление результатов расчета с экспериментальными данными, получение расчетным путем новой количественной информации).

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы

Самостоятельная работа по дисциплине «Математическое моделирование в физической химии» 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 над ними. При конспектировании лекции рекомендуется на каждой странице оставлять поля для последующих записей в дополнение к конспекту.

При работе над текстом лекции аспиранту следует обратить особое внимание на проблемные вопросы, поставленные преподавателем при чтении лекции, а так же на его задание и рекомендации.

Примерная тематика контрольных работ (рефератов)

Представленный реферат должен иметь титульный лист, план (содержание, оглавление), изложение (в соответствии с планом), заключение (выводы), список

использованной литературы. На титульном листе указывается университет, факультет и кафедра, тема реферата и название дисциплины; учёное звание, фамилия, имя и отчество преподавателя; фамилия, имя и отчество аспиранта. Объём реферата – 12-18 страниц.

1. Топологические индексы
2. Химическое строение и биологическая активность.
3. Строение молекул и лекарственное действие.
4. Теория химического строения
5. Симметрия молекул.
6. Симметрия и асимметрия в живой природе.
7. Геометрия молекул
8. Пространственная изомерия
9. Энтальпия образования и химическое строение.
10. Энтальпия атомизации и средние энергии связей.
11. Межмолекулярное взаимодействие
12. Молекула как система материальных точек.
13. Внутримолекулярные взаимодействия
14. Внутреннее вращение молекул
15. Развитие стереохимии
16. Пространственное строение полипептидов и белков
17. Стереои́зомерия аминокислот

Рекомендации по подготовке к практическим занятиям, контрольным работам зачёту

Самостоятельное изучение дисциплины целесообразно начинать, ознакомившись с программой дисциплины и требованиями к минимуму содержания, знаниям и умениям по данной дисциплине. Уяснив общую структуру курса, ознакомившись с зачетными вопросами, можно переходить к его поэтапному изучению, привлекая для этого материалы лекций и рекомендованную учебную литературу.

Изучая дисциплину, необходимо добиться полного усвоения ее теоретических основ, научиться применять теоретические знания для решения практических задач. Содержание незнакомых терминов, встретившихся в процессе освоения учебного материала, можно выяснить при помощи справочной литературы. Более сложные вопросы уточняются на консультациях с преподавателем кафедры.

Зачет по дисциплине включает:

- устный ответ на вопросы и выполнение контрольного задания;

При ответе на вопросы следует четко знать определения, дополнять каждый теоретический вопрос соответствующими примерами и графиками.

При оценке устного ответа на вопросы принимается во внимание:

1. полнота, глубина освещения вопроса, аргументированность изложения материала;
2. умение связывать теорию с практикой;
3. культура речи.

В ходе зачета преподаватель имеет право задавать дополнительные вопросы.

Пример построения варианта контрольного задания

Задание 1

Схема Фаянса для алканов имеет вид

1. $R_{cH}n2n+2 = (n-1)pc-c + (2n+2)pc-H$.
2. $R_{cH}n2n+2 = (n-1)pc-c + (2n+2)pn$.
3. $R_{cH}n2n+2 = (n)pc + (2n+2)pn$.

2. Задание 2

Подсчитайте число валентных и невалентных взаимодействий в молекулах циклопропана и циклобутана (в последнем случае – для плоского цикла и с учетом инверсии).

3 Задание 3

Составьте схемы расчёта свойств X-замещённых метана и его аналогов при учете парных взаимодействий атомов. Установите число параметров схем. Оцените предсказательные возможности теории.

Банк контрольных вопросов и заданий по учебной дисциплине

1. Что такое математическая модель. Приведите примеры.
2. Назовите основные этапы математического моделирования.
3. Назовите вычислительные методы в физике и химии.
4. Что такое численные методы решения задач?
5. Из чего складывается общая погрешность решения задачи?
6. Подсчитайте число валентных и невалентных взаимодействий в молекулах этана и пропана (в шахматных конформациях).
7. Подсчитайте число валентных и невалентных взаимодействий в молекулах этилена и бензола.
8. Подсчитайте число валентных и невалентных взаимодействий в молекулах циклопропана и циклобутана (в последнем случае – для плоского цикла и с учетом инверсии).
9. Составьте схемы расчёта свойств X-замещённых метана и его аналогов при учете парных взаимодействий атомов. Установите число параметров схем. Оцените предсказательные возможности теории.
10. Составьте схемы расчёта свойств X-замещённых этана (в шахматных конформациях) при учете парных взаимодействий атомов. Проведите численные расчеты энтальпий образования.
11. Составьте схемы расчёта свойств X-замещённых бензола при учете парных взаимодействий атомов. Проведите численные расчеты энтальпий образования.

Вопросы для подготовки к зачету

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 метана и его аналогов (силана, моногермана, станнана).

10. Схемы расчета свойств замещенных этана и его аналогов.

11. Схемы расчета свойств замещенных этилена.

12. Схемы расчета свойств замещенных бензола.

13. Схемы расчета свойств замещенных циклопропана.

14. Схемы расчета свойств замещенных кубана.

15. Взаимосвязь между различными схемами.

16. Предсказательные возможности теории.

17. Численные расчеты термодинамические свойств веществ (энтальпии образования, энтропии, энергии Гиббса, теплоты испарения).

18. Адекватность математической модели. Сопоставление результатов расчета с экспериментом.

VII. Материально-техническое обеспечение

Учебная аудитория (с классной доской и мелом, партами и стульями по количеству учащихся), канцелярские принадлежности, лабораторное оборудование.

VIII. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины

№п.п.	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Реквизиты документа, утвердившего изменения
1.			
2.			