

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Смирнов Александр Сергеевич
Должность: врио ректора
Дата подписания: 02.10.2024 09:01:52
Уникальный программный ключ:
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

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



Утверждаю:

Руководитель ООП:

П.М. Пахомов П.М. Пахомов

27 мая 2024 г.

Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)
Физико-химические расчеты

Направление подготовки
04.04.01 Химия

Направленность (профиль)
Физическая химия

Для студентов 1 курса очной формы обучения

Составитель: к.х.н., доцент Павлов А.С. _____

Тверь, 2021

I. Аннотация

1. Цель и задачи дисциплины:

Целью освоения дисциплины является: дать магистрам углубленное изучение основных принципов феноменологической теории и показать ее плодотворность при решении задач расчета и прогнозирования физико-химических свойств веществ, необходимых для практики и не изученных экспериментально.

Задачами освоения дисциплины являются:

- научить студентов строить аддитивные схемы
- применять аддитивные схемы при расчетах и прогнозировании физико-химических свойств веществ.

2. Место дисциплины в структуре ООП:

Дисциплина входит в Элективные дисциплины 3 обязательной части Блока 1. «Дисциплины» учебного плана.

Дисциплина «Физико-химические расчеты» расширяет и углубляет содержание дисциплин «Молекулярное моделирование», «Геометрия молекул и кристаллов в числах» «Молекулярная топология многоугольных фигур»,

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

контактная аудиторная работа: лекции - 30 часов, лабораторные работы - 30 часов, в т.ч. практическая подготовка - 30 часов;

самостоятельная работа: 57 часов, контроль 27 часов.

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

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине	Семестр
ОПК-1 Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	ОПК-1.1. Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук; ОПК-1.2. Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук. Владеть навыком записи аддитивных	1

		схем, учитывающих взаимное влияние атомов в явном виде	
ОПК-2	Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук	ОПК-2.1. Проводит критический анализ результатов собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук; ОПК-2.2. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук.	1

5. Форма промежуточной аттестации и семестр прохождения:
экзамен в 1-м семестре.

6. Язык преподавания русский.

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

1. Для магистрантов очной формы обучения:

№	Учебная программа – наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)		Самостоятельная работа (час.)	Контроль
			Лекции	Лабораторные занятия		
1	Схемы расчёта свойств в ряду изомеров замещения, родственных базисному соединению	46	12	12	10	12
2	Корреляции «топологический индекс матрицы расстояний МГ – свойство алкана»	50	12	12	14	12
3	Корреляции «коэффициенты характеристического полинома матрицы смежности молекулярных графов алкана – свойство вещества»	48	12	12	12	12
	Итого	144	36	36	36	36
	В том числе в интерактивной форме				60%	

III. Образовательные технологии

Учебная программа – наименование разделов и тем (в строгом соответствии с разделом II РПД)	Вид занятия	Образовательные технологии
1. Введение. Компьютерное моделирование физико-химических систем методами подобия (имитации)	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа в химической лаборатории • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии
2. Типы открытых, закрытых и замкнутых физико-химических систем	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа в химической лаборатории • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии
3. Элементы . физико-химических систем: Атомы, , химические связи ,молекулы, агрегаты. Макромолекулы, гели и сетки. Третичные структуры белков, клеточные мембраны. Низкомолекулярные компоненты химических систем	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа в химической лаборатории • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии

<p>4. Пользовательские интерфейсы компьютерных программ . Графические и текстовые интерфейсы.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа в химической лаборатории • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии
<p>5. Силы в физико-химических системах, существенные переменные Строение атома.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии
<p>6. Химическая связь. Межмолекулярные взаимодействия</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии
<p>7. Целевые функции в физико-химических системах и процессах</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа в химической лаборатории • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии

<p>8. Компьютерная сборка системы. Химические реакции и синтез и их компьютерная имитация...</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа в химической лаборатории • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии
<p>9. Основы химии твердого тела.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии
<p>10. Периодические граничные условия в компьютерном моделировании Водород.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа в химической лаборатории • решение задач и упражнений • проверка домашних заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • информационные (показ презентаций) • технология исследовательской деятельности (химический эксперимент) • технология модульного и блочно-модульного обучения • здоровьесберегающие технологии

Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине:

1. Учебная программа
2. Планы и методические указания по подготовке выполнению лабораторных работ
3. Методические рекомендации по организации самостоятельной работы, перечень вопросов для самостоятельной работы
4. Перечень основных понятий, изучение которых предусмотрено данной дисциплиной
5. Программа итогового экзамена по дисциплине

IV Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации

Этап формирования компетенции, в котором участвует дисциплина	Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков (2-3 примера)	Показатели и критерии оценивания компетенции, шкала оценивания
<p>Начальный</p> <p>Знать:</p> <p>понятие математической модели и очертить основные этапы математического моделирования</p>	<p>Тест № 1. Что такое математическая модель?</p> <p>a) Приближенное описание какого-либо объекта (явления, процесса) в терминах математики (вместе с граничными и начальными условиями).</p> <p>b) Определенное математическое выражение, описывающее изучаемый процесс или явление.</p> <p>c) Исходные предпосылки в постановке задачи.</p> <p>Тест № 2 Молекула метана имеет форму:</p> <p>a) пирамиды;</p> <p>b) параллелепипеда;</p> <p>c) тетраэдра;</p> <p>d) конуса.</p> <p>Тест № 3. Квантовое число l характеризует ...</p> <p>a) энергию электрона на атомной орбитали</p> <p>b) собственные значения оператора квадрата орбитального момента импульса</p>	<p>Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла;</p> <p>Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2 балла;</p> <p>Имеется верное решение только части задания – 1б.</p>

	<p>c) собственные значения оператора проекции орбитального момента импульса электрона</p> <p>d) ориентацию спинового момента электрона</p>	<p>1 балл – «3»</p> <p>2 балла – «4»</p> <p>3 балла – «5»</p>
<p>Уметь: -</p> <p>высказать и записать (в виде общего математического выражения) основной постулат феноменологической теории</p>	<p>1. Молекулярный топологический индекс (МТИ) Шульца определяется как сумма элементов матрицы ν ($A+D$), где A и D – матрицы смежности и расстояния, а ν – матрица строка степеней и вершин. Рассчитайте МТИ для 2-метилбутана.</p> <p>2. Изобразите вид кривых потенциальной энергии внутреннего вращения для</p>	

связи свойств	молекул вида $\text{CH}_2\text{X}-\text{CHXY}$	
веществ со строением молекул, пояснить его квантово-механическое		
обоснование и теоретико-графовое истолкование;		
Владеть: навыками построения математической (аддитивной) модели изомеров вершинного замещения базисной структуры (с известной группой симметрии) на основе разбиения многоугольных чисел.	<p>Тест № 1 Общая формула алканов:</p> <p>a) C_nH_{2n}; b) $\text{C}_n\text{H}_{2n+1}$; c) $\text{C}_n\text{H}_{2n-2}$; d) $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$.</p> <p>Тест № 2 Изомеры различаются:</p> <p>a) составом и строением молекул; b) составом молекул и химическими свойствами; c) физическими свойствами и строением молекул; d) составом молекул и физическими свойствами.</p> <p>Тест № 3. В каком случае свойство замещенных метана является кубической функцией числа заместителей?</p>	<p>Правильно выбран вариант ответа – 1 балл</p> <p>Тест из 3 заданий: 1 балл – «3», 2 балла – «4», 3 балла – «5»</p>

a) При учете только валентных взаимодействий. b) При учете парных невалентных взаимодействий. c) При учете тройных невалентных взаимодействий.

IV. Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации

Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции ПК-3 Готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований

Этап формирования компетенции, в котором участвует дисциплина	Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков (2-3 примера)	Показатели и критерии оценивания компетенции, шкала оценивания
---	--	--

<p>Начальный Знать: исходные предпосылки, необходимые для построения аддитивной схемы, и показать ход решения математической задачи, которой приводит модель</p>	<p>Тест 1. К методам построения аддитивных схем относятся? а) метод суммарной аппроксимации; б) метод Ломоносова; с) метод Жордана;</p> <p>Тест 2. При аддитивной схеме результативный показатель рассматривается как: а) алгебраическая сумма факторов; б) векторная сумма факторов; с) сумма определителей матрицы;</p> <p>Тест 3. Что такое стереохимическая конфигурация? а) Определенное расположение атомов около хиральных центров (или других диссимметричных частей) молекулы. б) Пространственное строение молекулы. с) Равновесная конфигурация ядерного скелета.</p>	<p>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»</p>
<p>Уметь: выбрать объекты исследования, провести их систематику, указать характерные особенности их строения; - получить предварительную оценку наиболее существенных свойств изучаемых или вновь синтезированных веществ.</p>	<p>1. Сколько независимых параметров нужно взять для описания равновесной ядерной конфигурации линейных и не линейных молекул вида $AХ_2$? приведите примеры таких молекул.</p> <p>2. Посчитайте фуллерене число верши, ребер и граней (в том числе пятиугольных и шестиугольных) проверьте формулу Эйлера.</p>	
<p>Владеть: методами и основными программными средствами для молекулярного моделирования</p>	<p>Тест № 1. Какие взаимодействия встречаются в молекуле этана (в выбранной шахматной конформации)? а. Валентные, невалентные через один и через два атома (<i>транс</i>-, <i>гош</i>-). б. Валентные, невалентные через один и через два атома (<i>транс</i>-, <i>цис</i>-).</p>	<p>Правильно выбран вариант ответа – 1 балл Тест из 3 заданий: 1</p>

с. Валентные, невалентные через один и балл – «3», 2
через два (*цис-*, *анти-*).

балла – «4», 3
балла – «5»

Тест № 2. При каких условиях свойство замещенных метана как квадратичная функция числа заместителей становится линейной функцией?

- a. При учете только валентных взаимодействий.
- b. При учете только парных валентных и невалентных взаимодействий.
- c. Когда выполняется условие для невалентных взаимодействий: взаимодействие разнородных частиц равно полусумме взаимодействий однородных частиц (допущение о среднем арифметическом).

Тест № 3. В каком случае свойство замещенных метана является кубической функцией числа заместителей?

- a) При учете только валентных взаимодействий.
- b) При учете парных невалентных взаимодействий.

<p>строения; - получить предварительн ую оценку наиболее существенных свойств изучаемых или вновь синтезированных веществ.</p>	<p>шестиугольных) проверьте формулу Эйлера.</p>	
<p>Владеть: методами и основными программными средствами для молекулярного моделирования</p>	<p>Тест № 1. Какие взаимодействия встречаются в молекуле этана (в шахматной конформации)? а. Валентные, невалентные через один и через два атома (<i>транс-, гом-</i>). б. Валентные, невалентные через один и через два атома (<i>транс-, цис-</i>). с. Валентные, невалентные через один и через два (<i>цис-, анти-</i>).</p> <p>Тест № 2. При каких условиях свойство замещенных метана как квадратичная функция числа заместителей становится линейной функцией? а. При учете только валентных взаимодействий. б. При учете только парных валентных и невалентных взаимодействий. с. Когда выполняется условие для невалентных взаимодействий: взаимодействие разнородных частиц равно полусумме взаимодействий однородных частиц (допущение о среднем арифметическом).</p> <p>Тест № 3. В каком случае свойство замещенных метана является кубической функцией числа заместителей? а) При учете только валентных взаимодействий. б) При учете парных невалентных взаимодействий. с) При учете тройных невалентных взаимодействий.</p>	<p>Правильно выбран вариант ответа – 1 балл Тест из 3 заданий: 1 балл – «3», 2 балла – «4», 3 балла – «5»</p>

V. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины:

а) Основная литература:

1. Клинов А.В. Математическое моделирование химико-технологических процессов [Электронный ресурс]: учебное пособие / А.В. Клинов, А.Г. Мухаметзянова. — Электрон. текстовые данные. — Казань: Казанский национальный исследовательский технологический университет, 2009. — 144 с. — 978-5-7882-0774-2. — Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/62483.html>

б) Дополнительная литература:

1. Криштафович, В.И. Физико-химические методы исследования: учебник / В.И. Криштафович, Д.В. Криштафович, Н.В. Еремеева. - Москва: Издательско-торговая корпорация «Дашков и К°», 2016. - 208 с. - (Учебные издания для бакалавров). - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-394-02417-7; То же
2. [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=453028>
3. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЧИСЛА ИЗОМЕРОВ X-, XY-, XYZ-И XYZU-ЗАМЕЩЕННЫХ АЛЛЕНА D 2 d И АДДИТИВНЫЕ СХЕМЫ РАСЧЕТА ЭНТАЛЬПИЙ ИСПАРЕНИЯ, Д.Ю. Нилов, В.М. Смоляков - Журнал физической химии, 2015, стр.63-72

2) Программное обеспечение

а) Лицензионное программное обеспечение

- Электронная образовательная среда ТВГУ <https://www.tversu.ru/informatisation/>
- Origin Pro
- HyperChem Pro. HyperCube Inc.
- Microsoft Office

б) Свободно распространяемое программное обеспечение

- Chem Office 7.0 2002
- ISISTM/Draw 2.4 2001

3) Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

- [Protein Data Bank](#)

4) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

Электронная образовательная среда ТВГУ <https://www.tversu.ru/informatisation/>

Техническая и учебная литература on-line используемого программного обеспечения, учебные материалы и средства учета на “облачном хранилище” с общим для учебной группы доступом в режиме редактирования.

VI. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины:

Учебная программа:

I. СХЕМЫ РАСЧЕТА СВОЙСТВ В РЯДУ ИЗОМЕРОВ ЗАМЕЩЕНИЯ, РОДСТВЕННЫХ БАЗИСНОМУ СОЕДИНЕНИЮ

Составление ряда X-, ХУ-...замещенных изомеров исходной молекулы. Построение расчетных схем для замещенных метана, этана, метилсилана, метиламина, пропана, этилена, бензола, циклопропана, призмана, кубана и др. Построение расчетных схем, различающихся выбором параметров. Установление взаимосвязи между различными схемами.

II. КОРРЕЛЯЦИИ «ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ИНДЕКС МАТРИЦЫ РАССТОЯНИЙ МГ – СВОЙСТВО АЛКАНА» Топологические индексы на основе матрицы смежности и матрицы расстояний.

Конструирование топологических индексов Загребской группы ученых, индексов Рандича, Винера, Балабана, МТИ, Харари и др.

Расчет энтальпий образования алканов с использованием топологических индексов матрицы смежности и матрицы расстояний химических графов алканов.

III. КОРРЕЛЯЦИИ «КОЭФФИЦИЕНТЫ ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКОГО ПОЛИНОМА МАТРИЦЫ СМЕЖНОСТИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ГРАФОВ.

IV. ФУНКЦИЯ QSAR PROPERTIES ПАКЕ ПРОГРАММ NURCHEM

Методические материалы позволяют обучающемуся оптимальным образом спланировать и организовать процесс освоения учебного материала. Методические материалы могут быть представлены в виде:

- вопросов для подготовки к зачету/экзамену;
- электронных презентаций;
- рекомендаций по подготовке к разным видам учебных занятий;
- рекомендаций по самостоятельной работе (темы, вопросы и т.д.);
- рекомендации по выполнению курсовых работ, рефератов, эссе;
- иное.

При наличии отдельно изданных методических пособий по дисциплине приводятся ссылки на ресурс или их выходные данные.

VII. Материально-техническое обеспечение

- Электронная образовательная среда ТВГУ <https://www.tversu.ru/informatisation/>
- Университетский центр Интернет
- Компьютерная класс с 10 объединенными в сеть компьютерами со средствами мультимедиа

VIII. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины

№п.п.	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Реквизиты документа, утвердившего изменения
1.	Раздел V. Учебно-методическое и информационное	Добавлены новые пособия в основной список литературы	Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-

	обеспечение дисциплины		технологического факультета
--	---------------------------	--	--------------------------------