

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич
Должность: врио ректора
Дата подписания: 26.03.2025 08:25:16
Уникальный программный ключ:
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fec3ad1bf35f08

УП: 04.05.01 ФПХ
Эксперт. мед. химия
2024.plx

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

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

24 апреля 2024 г.



Рабочая программа дисциплины

Математическое моделирование химических равновесий

Закреплена за кафедрой:	Неорганической и аналитической 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:	6

Программу составил(и):

канд. хим. наук, доц., Веселов Игорь Николаевич

Тверь, 2024

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели освоения дисциплины (модуля):

Освоение теоретических основ и практических навыков расчета равновесного состава гомогенных химических систем

Задачи :

1. Изучение теоретических основ метода математического моделирования химических равновесий;
2. Освоение использования метода для моделирования систем с различными типами взаимодействий;
3. Формирование умений и навыков использования метода применительно к реальным химическим системам.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ОП: Б1.В

Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Математика

Аналитическая химия

Неорганическая химия

Физическая химия

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

Дисциплина закладывает знания для подготовки выпускной квалификационной работы, производственной практики, самостоятельной научной работы.

Преддипломная практика

Научно-исследовательская работа

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость	3 ЗЕТ
Часов по учебному плану	108
в том числе:	
самостоятельная работа	44

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

- | | |
|-----------|---|
| Уровень 1 | Методы решения "прямой" и "обратной" задачи для моделирование химических равновесий для систем разных типов; Области применимости методов |
| Уровень 1 | Строить по исходным данным матрицу стехиометрических коэффициентов; Рассчитывать константы равновесия на основе справочных и экспериментальных данных; С использованием математических методов рассчитывать равновесные концентрации веществ. |
| Уровень 1 | Методы решения "прямой" и "обратной" задачи для моделирование химических равновесий для систем разных типов |

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

- Уровень 1 Основные компьютерные программы по методу математического моделирования химических равновесий
- Уровень 1 Выбирать наиболее подходящую для решения задачи программу
- Уровень 1 Свободной эксплуатацией компьютерной техники и основных компьютерных программ по методу математического моделирования химических равновесий

ПК-1.3: Готовит объекты исследования

- Уровень 1 Методы вычисления коэффициентов активности компонентов; основные понятия математической статистики, применяемые для обработки результатов наблюдений; правила подготовки и ввода исходных данных для компьютерного расчета
- Уровень 1 Рассчитывать константы равновесия на основе справочных и экспериментальных данных
- Уровень 1 Методы решения "прямой" и "обратной" задачи для моделирование химических равновесий для систем разных типов

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

- Уровень 1 Основные базы данных, которые можно использовать в качестве источников информации
- Уровень 1 Осуществляет целенаправленный поиск необходимой информации
- Уровень 1 Владеет методами поиска необходимой информации

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

- Уровень 1 Основные базы данных, которые можно использовать в качестве источников информации
- Уровень 1 Сопоставляет данные, получаемые из различных источников, определяет их достоверность и применимость для конкретной ситуации
- Уровень 1 Владеет методами поиска необходимой информации

5. ВИДЫ КОНТРОЛЯ

Виды контроля в семестрах:	
зачеты	6

6. ЯЗЫК ПРЕПОДАВАНИЯ

Язык преподавания: русский.

7. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

№	Наименование разделов и тем	Вид занятия	Сем.	Часов	Примечание
	Раздел 1. Введение				
1.1	Введение в математическое моделирование химических равновесий	Лек	6	1	
	Раздел 2. Математические основы моделирования химических равновесий				

2.1	Основные законы химических равновесий. Формулировка «прямой задачи» для гомогенных химических равновесий в растворах. Основные понятия математической статистики, применяемые для обработки результатов наблюдений. Базис и расширенный базис. Матрица стехиометрических коэффициентов.	Лек	6	3	
2.2	Составление расширенного базиса и матрицы стехиометрических коэффициентов для равновесных процессов.	Лаб	6	4	
2.3	Составление расширенного базиса и матрицы стехиометрических коэффициентов для равновесных процессов.	Ср	6	3	
	Раздел 3. Компьютерная программа для метода математического моделирования равновесий Solution RSS				
3.1	Знакомство с программами для расчета равновесных концентраций. Правила подготовки и ввода исходных данных для компьютерного расчета. Форма представления результатов расчетов. Интерпретация полученных результатов.	Лек	6	2	
3.2	Использование программы. Выбор базисных частиц и его влияние на итоговую матрицу стехиометрических коэффициентов.	Лаб	6	4	
3.3	Использование программы.	Ср	6	3	
	Раздел 4. Моделирование кислотно-основных равновесий				
4.1	Выбор базисных частиц. Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе.	Лек	6	3	
4.2	Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Построение долевого распределения кислотно-основных форм в растворе. Построение кривых титрования в различных комбинациях.	Лаб	6	6	
4.3	Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Построение долевого распределения кислотно-основных форм в растворе. Построение кривых титрования в различных комбинациях.	Ср	6	9	
	Раздел 5. Моделирование равновесий комплексообразования				

5.1	Выбор базисных частиц. Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Прогнозирование поведения системы при различных воздействиях на нее (влияние рН, соотношения компонентов и т.д.).	Лек	6	3	
5.2	Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Построение долевого распределения комплексных форм в растворе. Построение кривых титрования в различных комбинациях. Прогнозирование поведения системы при различных воздействиях на нее (влияние рН, соотношения компонентов и т.д.).	Лаб	6	6	
5.3	Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Построение долевого распределения комплексных форм в растворе. Построение кривых титрования в различных комбинациях. Прогнозирование поведения системы при различных воздействиях на нее (влияние рН, соотношения компонентов и т.д.).	Ср	6	9	
	Раздел 6. Моделирование окислительно-восстановительных равновесий				
6.1	Выбор базисных частиц. Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Построение кривых кулонометрическим методом (гальваностатический режим).	Лек	6	3	
6.2	Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Построение кривых титрования в различных комбинациях титрантов. Построение кривых кулонометрическим методом (гальваностатический режим). Прогнозирование поведения системы при различных воздействиях на нее (влияние рН, соотношения компонентов, ОВ-потенциала и т.д.)	Лаб	6	8	

6.3	Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Построение кривых титрования в различных комбинациях титрантов. Построение кривых кулонометрическим методом (гальваностатический режим). Прогнозирование поведения системы при различных воздействиях на нее (влияние рН, соотношения компонентов, ОВ-потенциала и т.д.)	Ср	6	10	
	Раздел 7. Моделирование комбинированных химических равновесий				
7.1	Выбор базисных частиц. Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Прогнозирование поведения системы при различных воздействиях на нее (влияние рН, соотношения компонентов, ОВ-потенциала, лигандов и т.д.)	Лек	6	3	
7.2	Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Построение долевого распределения окислительно-восстановительных, кислотно-основных, комплексных форм в растворе. Построение кривых титрования в различных комбинациях титрантов, включая кулонометрическое титрование в гальваностатическом режиме. Прогнозирование поведения системы при различных воздействиях на нее (влияние рН, соотношения компонентов, ОВ-потенциала, лигандов и т.д.)	Лаб	6	8	
7.3	Составление расширенного базиса. Расчет равновесных концентраций всех частиц в растворе. Построение долевого распределения окислительно-восстановительных, кислотно-основных, комплексных форм в растворе. Построение кривых титрования в различных комбинациях титрантов, включая кулонометрическое титрование в гальваностатическом режиме. Прогнозирование поведения системы при различных воздействиях на нее (влияние рН, соотношения компонентов, ОВ-потенциала, лигандов и т.д.)	Ср	6	10	

Образовательные технологии

1. Традиционные (лекция, решение упражнений),
2. Цифровые (показ презентаций, выполнение практических работ),
3. Групповая работа

Список образовательных технологий

1	Информационные (цифровые) технологии
---	--------------------------------------

8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

8.1. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации

Оценочные материалы для проведения текущей аттестации приведены в приложении

2

8.2. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации

Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации приведены в приложении 2

8.3. Требования к рейтинг-контролю

Структура рейтинговых баллов:

1. Первый модуль

- Задачи на моделирование кислотно-основных взаимодействий - 10 б.
- Задачи на моделирование процессов комплексообразования - 10 б.
- Модульная контрольная 1 - 20 б.

Итого за 1 модуль - 40 б.

2. Второй модуль

- Задачи на моделирование окислительно-восстановительных равновесий - 10 б.
- Задачи на моделирование комбинированных взаимодействий - 20 б.
- Модульная контрольная 2 - 30 б.

Итого за второй модуль - 60 б.

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

Рекомендуемая литература

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"

Э1	eLIBRARY.RU : науч. электрон. б-ка : сайт. Москва, 2000. URL: https://elibrary.ru (дата обращения: 14.02.2024). Режим доступа: для зарегистрир. пользователей.: https://elibrary.ru
Э2	LMS : Система управления обучением : сайт. Тверь, 2024. URL: https://lms.tversu.ru (дата обращения: 14.02.2024). Режим доступа: для студентов ТвГУ: https://lms.tversu.ru
Э3	Расчет химических равновесий в растворах : сайт. Москва. URL https://chemequ.ru (дата обращения: 14.02.2024).: https://chemequ.ru
Э4	Электронная библиотека учебных материалов по химии : сайт. Москва. URL: https://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/welcome.html (дата обращения: 14.02.2024).: https://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/welcome.html
Э5	Учебные материалы : Аналитическая химия: сайт. Москва. URL: https://chembaby.ru/predmety/analiticheskaya-ximiya/materials (дата обращения: 14.02.2024).: https://chembaby.ru/predmety/analiticheskaya-ximiya/materials

Перечень программного обеспечения

1	Google Chrome
2	Kaspersky Endpoint Security 10 для Windows
3	Многофункциональный редактор ONLYOFFICE
4	ОС Linux Ubuntu
5	Adobe Acrobat Reader
6	Foxit Reader

Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

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

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

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

11. МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Методические материалы и указания приведены в приложении 1