

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич
Должность: врио ректора
Дата подписания: 13.09.2023 14:59:50
Уникальный программный ключ:
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

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



Утверждаю:
Руководитель ООП:
Виноградова М.Г.
«21» 09 2017 г.

Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Направление подготовки
04.06.01 ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

Направленность (профиль) подготовки

Физическая химия
Для аспирантов 2 года обучения

Подготовка кадров высшей квалификации

Составитель: Виноградова М.Г.

Тверь, 2017

I. Аннотация

1. Наименование дисциплины в соответствии с учебным планом

Математическое моделирование в физической химии

2. 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.

3. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Математическое моделирование в физической химии» входит в раздел «Дисциплины по выбору». Дисциплина непосредственно связана с дисциплинами «Физическая химия», «Симметрия молекул и кристаллов»".

4. Объем дисциплины :

___4___ зачетных единиц, ___144___ академических часов, **в том числе контактная работа:** лекции ___6___ часов, практические занятия ___6___ часов, лабораторные работы ___0___ часов, самостоятельная работа: ___132___ часов.

___4___ зачетных единиц, ___144___ академических часов, **в том числе контактная работа:** лекции ___4___ часа, практические занятия ___4___ часа, лабораторные работы ___0___ часов, самостоятельная работа: ___136___ часов (заочная форма обучения).

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
---	---

компетенции)	
<p>ОПК-2 обладать готовностью организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук</p>	<p>Владеть:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. поиском информации в глобальной сети интернет; 2. современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований. <p>Уметь:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. записать аддитивные схемы, учитывающие взаимное влияние атомов в явном виде (по взаимодействиям атомов) 2. применять полученные знания на практике. <p>Знать: химическое и стереохимическое строение, типы изомерии; внутримолекулярные взаимодействия; понятие математической модели; основные этапы математического моделирования.</p>
<p>УК-5 обладать способностью планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития</p>	<p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - поиском информации в глобальной сети интернет; - современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований. <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - составлять аддитивные схемы расчёта - применять полученные знания на практике. <p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - понятие математической модели; - основные этапы математического моделирования.
<p>ПК-1 способность подбора инструментальной базы для решения научных, научно-прикладных задач</p>	<p>Владеть: поиском информации в глобальной сети интернет; современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований</p> <p>Уметь:-применять методы математического моделирования</p> <p>Знать: Методы математического моделирования в физической химии</p>

6. Форма промежуточной аттестации - зачет.

7. Язык преподавания русский

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

1. Для аспирантов очной формы обучения

Учебная программа – наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)		Самостоятельная работа (час.)
		Лекции	Практические 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

2. Для аспирантов заочной формы обучения (3 год обучения)

Учебная программа – наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)		Самостоятельная работа (час.)
		Лекции	Практические занятия	
Математическое моделирование	21	1		20
Внутримолекулярные взаимодействия	58	1		57
Атом-атомное представление	35	1	2	32
Построение расчетных схем и их применение	30	1	2	27
ИТОГО	144	4	4	136

III. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной

работы обучающихся по дисциплине

Учебная программа

Планы и методические указания по подготовке к практическим (семинарским) занятиям, темы практических (семинарских) занятий

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы

Примерная тематика контрольных работ (рефератов)

Рекомендации по подготовке к практическим занятиям, контрольным работам зачёту

IV. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

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

Этап формирования компетенции, в котором участвует дисциплина	Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков (2-3 примера)	Показатель и критерии оценивания компетенции, шкала оценивания
владеть: поиском информации в глобальной сети интернет; современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передачи информации при проведении самостоятельных научных исследований.	Кейс: 1. Химическая топология изучает : а) Молекулы с разной геометрической конфигурацией б) Молекулы, отличающиеся типом химических связей в) Катенаны, ротаксаны, узлы, молекулярные ленты Мёбиуса и другие такого рода образования. 2. Какие взаимодействия встречаются в молекуле этана (в шахматной конформации)? 1. Валентные, невалентные через один и через два атома (<i>транс-</i> , <i>гош-</i>). 2. Валентные, невалентные через один и через два атома (<i>транс-</i> , <i>цис-</i>). 3. Валентные, невалентные через один и через два (<i>цис-</i> , <i>анти-</i>).	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>3. Что такое стереохимическая конфигурация?</p> <p>1. Определенное расположение атомов около хиральных центров (или других диссимметричных частей) молекулы.</p> <p>2. Пространственное строение молекулы.</p> <p>3. Равновесная конфигурация ядерного скелета.</p>	
<p>Уметь</p> <p>- записать аддитивные схемы, учитывающие взаимное влияние атомов в явном виде (по взаимодействиям атомов)</p> <p>- применять полученные знания на практике.</p>	<p>Составьте схемы расчёта свойств X-замещённых метана и его аналогов при учете парных взаимодействий атомов. Установите число параметров схем. Оцените предсказательные возможности теории.</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;</p> <p>• Имеется верное решение только части задания – 1 балл. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3 балла – «5»</p>
<p>Знать:</p> <p>- химическое и стереохимическое строение, типы изомерии;</p> <p>- внутримолекулярные взаимодействия;</p> <p>- понятие математической модели;</p>	<p>1. К структурной изомерии относится:</p> <p>а) оптическая изомерия;</p> <p>б) изомерия скелета;</p> <p>в) геометрическая изомерия;</p> <p>г) поворотная изомерия.</p> <p>2. Что такое химическое строение?</p> <p>2. Порядок (последовательность и кратность) связи атомов в молекуле.</p> <p>3. Расположение атомов в пространстве.</p> <p>4. Конфигурация молекулы.</p>	<p>Правильно выбран вариант ответа – 1 балл</p> <p>Тест из 3 заданий: 1 балл – «3» , 2 балла – «4» , 3 балла – «5»</p>

<p>- основные этапы математического моделирования.</p>	<p>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.</p>	
--	---	--

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

<p>Этап формирования компетенции, в котором участвует дисциплина</p>	<p>Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков (2-3 примера)</p>	<p>Показатель и критерии оценивания компетенции, шкала оценивания</p>
<p>владеть: поиском информации в глобальной сети интернет; современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передачи информации при проведении самостоятельных научных исследований.</p>	<p>Кейс: 1. Сколько парных взаимодействий (среди них валентных и невалентных) в молекуле метана? 1. $4 (= 4с_{H_0} + 6н_{H_1})$. 2. $6 (= 4с_{H_0} + 2н_{H_1})$. 3. $10 (= 4с_{H_0} + 10н_{H_1})$. 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</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>других диссимметричных частей) молекулы.</p> <p>2. Пространственное строение молекулы.</p> <p>3. Равновесная конфигурация ядерного скелета.</p>	
<p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - составлять аддитивные схемы расчёта; - применять полученные знания на практике. 	<p>Составьте схему расчёта свойств X-замещённых алкенов в третьем приближении</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>Знать: - понятие математической модели;</p> <ul style="list-style-type: none"> - основные этапы математического моделирования. 	<p>Что такое математическая модель</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Приближенное описание какого-либо объекта (явления, процесса) в терминах математики (вместе с граничными и начальными условиями). 2. Определённое математическое выражение, описывающее изучаемый процесс или явление. 3. Исходные предпосылки в постановке задачи. <p>Общая погрешность решения задачи складывается из:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Погрешности математической модели; 2. Погрешности метода решения задачи, к которой приводит модель; 3. Погрешности математической модели + погрешности метода решения 	<p>Правильно выбран вариант ответа – 1 балл</p> <p>Тест из 3 заданий: 1 балл – «3», 2 балла – «4», 3 балла – «5»</p>

	<p>задачи, к которой приводит модель, + вычислительной погрешности.</p> <p>3. Схема Фаянса для алканов имеет вид</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. $P_{C_nH_{2n+2}} = (n-1)pc-c + (2n+2)pc-n .$ 2. $P_{C_nH_{2n+2}} = (n-1)pc-c + (2n+2)pn .$ 3. $P_{C_nH_{2n+2}} = (n)pc + (2n+2)pn .$ 	
--	--	--

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

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>Владеть: поиском информации в глобальной сети интернет; современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. При каких условиях свойство замещенных метана как квадратичная функция числа заместителей становится линейной функцией? <ol style="list-style-type: none"> 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: <ol style="list-style-type: none"> а) характеристики (инварианты) графа, не 	<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>зависящие от способа нумерации его вершин;</p> <p>б) подстановки, действующие на множестве вершин графа;</p> <p>в) подстановки на множестве вершин графа, сохраняющие смежность вершин.</p> <p>3. В чем принципиальное отличие результатов получаемых методом молекулярной динамики и методом Монте-Карло</p> <p>1. статические и динамические характеристики совпадают;</p> <p>2. совпадают только динамические характеристики;</p> <p>3. совпадают только статические характеристики;</p> <p>4. в методе Монте-Карло нет времени</p>	
<p>Уметь:-применять методы математического моделирования</p>	<p>общая погрешность решения задачи складывается из:</p> <p>1. Погрешности математической модели;</p> <p>2. Погрешности метода решения задачи, к которой приводит модель;</p> <p>3. Погрешности математической модели + погрешности метода решения задачи, к которой приводит модель, + вычислительной погрешности.</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>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.</p>	
<p>Знать: Методы математического моделирования в физической химии</p>	<p>1. Наиболее распространённым программным продуктом для визуализации молекулярных структур является:</p> <ul style="list-style-type: none"> – RasMol – Origin – HyperChem – MolMol <p>2. Укажите правильное основное предназначение программ из пакета MS Office (например а-2)</p> <ol style="list-style-type: none"> а. Word б. Excel в. Access г. Power Point д. Outlook е. Publisher <p>5. настольная издательская система, предназначена для создания профессионально оформленных публикаций;</p> <p>6. система управления базами данных, предназначена для</p>	<p>Правильно выбран вариант ответа – 1 балл Тест из 3 заданий: 1 балл – «3», 2 балла – «4», 3 балла – «5»</p>

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

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

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.html

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

VI. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети

«Интернет», необходимых для освоения дисциплины <http://www.xumuk.ru/>

1. <http://www.studarhiv.ru/dir/cat16/subj19/file932/view932.html>
2. <http://www.alhimik.ru/teleclass/glava3/gl-3-1.shtml>
3. <http://www.ostu.ru/personal/sim/Concept/DAT/planlex.html>
4. http://www.krugosvet.ru/enc/nauka_i_tehnika/himiya/BIOHIMIYA.html
5. <http://ximozal.ucoz.ru/photo/1>

VII. Методические указания 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 взаимосвязи 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. $Pc_nH_{2n+2} = (n-1)pc-c + (2n+2)pc-n$.
2. $Pc_nH_{2n+2} = (n-1)pc-c + (2n+2)pn$.
3. $Pc_nH_{2n+2} = (n)pc + (2n+2)pn$.

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.

3 **Задание 4** Определение параметров (в кДж/моль) МНК дает для энтальпий образования $\Delta_f H^0_{298 (г)}$ X-замещённых метана при X = D, T, F, Cl:

$$\Delta_f H^0 CH_{4-l} D_l = -74,829 - 4,409 l + 0,094 l^2 \quad (l = 0, 1, 2, 3, 4);$$

$$\Delta_f H^0 CH_{4-l} T_l = -74,897 - 3,851 l + 0,086 l^2 \quad (l = 0, 1, 2, 3, 4);$$

$$\Delta_f H^0 CH_{4-l} F_l = -73,38 - 170,76 l - 11,28 l^2 \quad (l = 0, 1, 2, 3, 4);$$

$$\Delta_f H^0 CH_{4-l} Cl_l = -72,56 - 16,12 l + 2,46 l^2 \quad (l = 0, 1, 2, 3, 4).$$

Рассчитайте величины $\Delta_f H^0_{298 (г)}$ дейтеро-, тритий-, фтор-, хлорзамещённых метана. Сопоставьте результаты расчета с экспериментом.

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.

VIII. Перечень педагогических и информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (по необходимости)

В процессе освоения дисциплины используются следующие образовательные технологии, способы и методы формирования компетенций: проблемная лекция, деловая учебная игра, упражнения.

IX. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

1. Учебная доска.
2. Мультимедийный проектор,
3. Экран,
4. Компьютер.

X. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины

№п.п.	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Дата и протокол заседания кафедры, утвердившего изменения
1.	V. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	Обновлён список основной и дополнительной литературы	Протокол № 11 от 18.05.2017
2.			