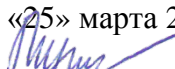



МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Утверждено:  
на заседании кафедры  
протокол № 4 от «25» марта 2021 г.  
Зав. кафедрой  /Мустафин А.Г.

Согласовано:  
Председатель УМК химического факультета  
 /Гарифуллина Г.Г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

Дисциплина

**Методы математического моделирования в химии**


Часть, формируемая участниками образовательных отношений

**программа магистратуры**

Направление подготовки (специальность).  
04.04.01. Химия

Направленность (профиль) подготовки  
Физическая химия

Квалификация  
Магистр

Разработчик (составитель) к.х.н., доцент Насретдинова Р.Н.	 /Насретдинова Р.Н. <small>подпись</small>
---	--

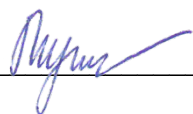
Для приема: 2021 г.

Уфа 2021г.

Составитель: к.х.н., доцент Насретдинова Р.Н.

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры физической химии и химической экологии, протокол № 4 от «25» марта 2021 г.

Заведующий кафедрой

  
\_\_\_\_\_ / Мустафин А.Г.

### Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций	4
2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы	6
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)	6
4. Фонд оценочных средств по дисциплине	7
4.1. Перечень компетенций и индикаторов достижения компетенций с указанием соотнесенных с ними запланированных результатов обучения по дисциплине. Описание критериев и шкал оценивания результатов обучения по дисциплине.	7
4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.	14
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	25
5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	25
5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы	27
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	28

## 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций

По итогам освоения дисциплины обучающийся должен достичь следующих результатов обучения:

Категория (группа) компетенций (при наличии ОПК)	Формируемая компетенция (с указанием кода)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	
Представление результатов профессиональной деятельности	<i>ПК-1.</i> способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты	<i>ПК-1.1.</i> Знать научную новизну и важность практического использования данных, полученных при выполнении магистерской диссертации.	Знать: научную новизну и важность практического использования данных, полученных при выполнении магистерской диссертации.	
		<i>ПК-1.2.</i> Знать основную литературу по тематике исследования, преимущества и недостатки теоретических и экспериментальных методов используемых в НИР.	Знать: основную литературу по тематике исследования, преимущества и недостатки теоретических и экспериментальных методов используемых в НИР.	
		<i>ПК-1.3.</i> Уметь на основе литературы выделять и использовать для объяснения результатов НИР теоретическую основу экспериментальных методов синтеза и анализа	Уметь: на основе литературы выделять и использовать для объяснения результатов НИР теоретическую основу экспериментальных методов синтеза и анализа	
		<i>ПК-1.4.</i> Уметь правильно составлять конспект статьи/книги, определять главные положения предшествующих работ по данной тематике	Уметь: правильно составлять конспект статьи/книги, определять главные положения предшествующих работ по данной тематике	
		<i>ПК-1.5.</i> Владеть начальными навыками в формулировке тематики НИР по результатам первичного анализа литературных данных в выбранной области исследований.	Владеть: начальными навыками в формулировке тематики НИР по результатам первичного анализа литературных данных в выбранной области исследований.	
		<i>ПК-1.6.</i> Владеть навыками экспериментальных и теоретических работ и по теме НИР магистерской диссертации	Владеть: навыками экспериментальных и теоретических работ и по теме НИР магистерской диссертации	
	<i>ПК-3.</i> готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований		<i>ПК-3.1.</i> Знать оборудование и программы предназначенные для проведения синтеза и исследование различных ФХ свойств веществ.	Знать: оборудование и программы предназначенные для проведения синтеза и исследование различных ФХ свойств веществ.
			<i>ПК-3.2.</i> Уметь проводить эксперимент на научном оборудовании, проводить обработку результатов и измерений с использованием специализированных компьютерных программ.	Уметь: проводить эксперимент на научном оборудовании, проводить обработку результатов и измерений с использованием специализированных компьютерных программ.

		<i>ПК-3.3.</i> Владеть основами пробоподготовки для проведения различных ФХА.	Владеть: основами пробоподготовки для проведения различных ФХА.
		<i>ПК-3.4.</i> Владеть начальными навыками работы со специализированным научным оборудованием	Владеть: начальными навыками работы со специализированным научным оборудованием
<i>ПК-4.</i> способностью участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати)		<i>ПК-4.1.</i> Знать основные правила ведения научной дискуссии	Знать: основные правила ведения научной дискуссии
		<i>ПК-4.2.</i> Знать основные требования к стендовым/устным докладам при представлении полученных результатов НИР	Знать: Основные требования к стендовым/устным докладам при представлении полученных результатов НИР
		<i>ПК-4.3.</i> Уметь высказывать свою точку зрения и участвовать в диалоге (студент-студент, студент-преподаватель, студент-сотрудник лаборатории).	Уметь: высказывать свою точку зрения и участвовать в диалоге (студент-студент, студент-преподаватель, студент-сотрудник лаборатории).
		<i>ПК-4.4.</i> Владеть навыками участия в многосторонней научной беседе, используя в устной речи специфическую химическую терминологию	Владеть: навыками участия в многосторонней научной беседе, используя в устной речи специфическую химическую терминологию
<i>ПК-6.</i> способностью определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения, брать на себя ответственность за результат деятельности		<i>ПК-6.1.</i> Знать основные возможные проблемы своей профессиональной деятельности	Знать: основные возможные проблемы своей профессиональной деятельности
		<i>ПК-6.2.</i> Знать пути решения возникающих проблем	Знать: пути решения возникающих проблем
		<i>ПК-6.3.</i> Уметь выявлять возникающие проблемы и осуществлять их разбор с целью поиска путей их решения	Уметь: выявлять возникающие проблемы и осуществлять их разбор с целью поиска путей их решения
		<i>ПК-6.4.</i> Уметь выделять главные проблемы при исполнении своей профессиональной деятельности	Уметь: выделять главные проблемы при исполнении своей профессиональной деятельности
		<i>ПК-6.4.</i> Владеть способностью к определению и анализу проблем, возникающих при исполнении своей профессиональной деятельности	Владеть: способностью к определению и анализу проблем, возникающих при исполнении своей профессиональной деятельности
<i>ПК-7.</i> владением методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования		<i>ПК-7.1.</i> Знать основную литературу по методике преподавания химии, проведению экспериментальных работ.	Знать: основную литературу по методике преподавания химии, проведению экспериментальных работ.
		<i>ПК-7.2.</i> Уметь правильно составлять конспект лекций, определять главные положения изложения предмета.	Уметь: правильно составлять конспект лекций, определять главные положения изложения предмета.
		<i>ПК-7.3.</i> Уметь на основе учебной литературы выделять	Уметь: на основе учебной литературы выделять главное и

		главное и использовать эти сведения для объяснения результатов практических работ, обладать навыками подбора и решения задач для проведения семинарских занятий	использовать эти сведения для объяснения результатов практических работ, обладать навыками подбора и решения задач для проведения семинарских занятий
		<i>ПК-7.4.</i> Владеть навыками в отборе материала для проведения практических занятий и лабораторных работ по результатам анализа литературных данных.	Владеть: навыками в отборе материала для проведения практических занятий и лабораторных работ по результатам анализа литературных данных.

## 2. Цели и место дисциплины в структуре образовательной программы

Целями освоения дисциплины "Методы математического моделирования в химии" является формирование компетенций связанных с:

знанием основные положения статистического анализа данных, постулатов реакционной способности, корреляционного анализа, квантовой химии;

формированием и развитием у студентов основы химического мышления;

выработкой навыков оценки свойств молекулярных систем различными эмпирическими методами, решения прямой и обратной задач химической кинетики, использования неэмпирических и полуэмпирических методов изучения электронного строения атомов и молекул.

Дисциплина «Методы математического моделирования в химии» относится к части ОП, формируемой участниками образовательных отношений.

Дисциплина изучается на 1 году обучения во 1 семестре.

Особенностью курса является активное использование и углубление тех знаний, которые студенты приобретают при изучении предшествующих курсов, включая многие разделы химической термодинамики, химической кинетики и катализа, квантовой механики и квантовой химии.

## 3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)

Содержание рабочей программы представлено в Приложении № 1.

#### 4. Фонд оценочных средств по дисциплине

##### 4.1. Перечень компетенций и индикаторов достижения компетенций с указанием соотнесенных с ними запланированных результатов обучения по дисциплине. Описание критериев и шкал оценивания результатов обучения по дисциплине.

Код и формулировка компетенции **ПК-1.** способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения	
		«Не зачтено»	«Зачтено»
<b>ПК-1.1.</b> Знать научную новизну и важность практического использования данных, полученных при выполнении магистерской диссертации.	Знать: научную новизну и важность практического использования данных, полученных при выполнении магистерской диссертации.	Затрудняется в определении научной новизны и практической значимости полученных данных	Знает научную новизну и важность практического использования данных, полученных при выполнении НИР
<b>ПК-1.2.</b> Знать основную литературу по тематике исследования, преимущества и недостатки теоретических и экспериментальных методов используемых в НИР.	Знать: основную литературу по тематике исследования, преимущества и недостатки теоретических и экспериментальных методов используемых в НИР.	Затрудняется в выборе литературы по тематике исследования. Плохо ориентируется в преимуществах и недостатках экспериментальных методов	Уверенно выбирает литературу по тематике исследования, знает преимущества и недостатки теоретических и экспериментальных методов используемых в НИР.
<b>ПК-1.3.</b> Уметь на основе литературы выделять и использовать для объяснения результатов НИР теоретическую основу экспериментальных методов синтеза и анализа	Уметь: на основе литературы выделять и использовать для объяснения результатов НИР теоретическую основу экспериментальных методов синтеза и анализа	Затрудняется в выделении теоретической основы экспериментальных методов используемых в НИР	Самостоятельно определяет теоретическую основу экспериментальных методов НИР с привлечением литературы

<p><b>ПК-1.4</b> Уметь правильно составлять конспект статьи/книги, определять главные положения предшествующих работ по данной тематике</p>	<p>Уметь: правильно составлять конспект статьи/книги, определять главные положения предшествующих работ по данной тематике</p>	<p>Затрудняется в составлении конспекта</p>	<p>Правильно составляет конспекты, самостоятельно выделяет главные положения предшествующих работ</p>
<p><b>ПК-1.5</b> Владеть начальными навыками в формулировке тематики НИР по результатам первичного анализа литературных данных в выбранной области исследований.</p>	<p>Владеть: начальными навыками в формулировке тематики НИР по результатам первичного анализа литературных данных в выбранной области исследований.</p>	<p>Затрудняется в проведении первичного литературного анализа в выбранной области исследований</p>	<p>Способен формулировать тематику НИР по результатам литературного анализа в выбранной области исследований.</p>
<p><b>ПК-1.6</b> Владеть навыками экспериментальных и теоретических работ и по теме НИР магистерской диссертации</p>	<p>Владеть: навыками экспериментальных и теоретических работ и по теме НИР магистерской диссертации</p>	<p>Затрудняется в проведении экспериментальных и теоретических работ и по теме НИР диссертации</p>	<p>Показывает уверенное владение навыками экспериментальных и теоретических работах по теме НИР диссертации</p>



Код и формулировка компетенции **ПК-3.** готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения	
		«Не зачтено»	«Зачтено»
<b>ПК-3.1.</b> Знать оборудование и программы предназначенные для проведения синтеза и исследование различных ФХ свойств веществ.	Знать: оборудование и программы предназначенные для проведения синтеза и исследование различных ФХ свойств веществ.	Затрудняется в определении и назначении компонентов прибора и программ.	Самостоятельно подключает компоненты приборов. Имеет представления о нормальном и критическом режимах их функционирования. Способен диагностировать простые ошибки приборов и программ управления
<b>ПК-3.2.</b> Уметь проводить эксперимент на научном оборудовании, проводить обработку результатов и измерений с использованием специализированных компьютерных программ.	Уметь: проводить эксперимент на научном оборудовании, проводить обработку результатов и измерений с использованием специализированных компьютерных программ.	Затрудняется в проведении эксперимента на научном оборудовании использовании специализированных программ	Самостоятельно осуществляет все этапы эксперимент на научном оборудовании, проводит обработку результатов и измерений с использованием специализированных компьютерных программ.
<b>ПК-3.3.</b> Владеть основами пробоподготовки для проведения различных ФХА.	Владеть: основами пробоподготовки для проведения различных ФХА.	Затрудняется в подготовке проб и объектов для последующего исследования.	Самостоятельно способен осуществить полный цикл пробоподготовки
<b>ПК-3.4.</b> Владеть начальными навыками работы со специализированным	Владеть: начальными навыками работы со специализированным научным оборудованием	Затрудняется в порядке включения и выключения прибора, снятии показаний измерений	Способен к проведению полного цикла работ на специализированном научном

научным оборудованием			оборудовании при проведении экспериментов невысокой сложности
--------------------------	--	--	---

Код и формулировка компетенции **ПК-4.** способностью участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати)

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения	
		«Не зачтено»	«Зачтено»
<b>ПК-4.1.</b> Знать основные правила ведения научной дискуссии	Знать: основные правила ведения научной дискуссии	Затрудняется в ведении научной дискуссии	Знает основные правила ведения научной дискуссии
<b>ПК-4.2.</b> Знать основные требования к стендовым/устным докладам при представлении полученных результатов НИР	Знать: Основные требования к стендовым/устным докладам при представлении полученных результатов НИР	Затрудняется в оформлении результатов НИР по правилам	Знает основные требования к стендовым/устным докладам.
<b>ПК-4.3.</b> Уметь высказывать свою точку зрения и участвовать в диалоге (студент-студент, студент-преподаватель, студент-сотрудник лаборатории).	Уметь: высказывать свою точку зрения и участвовать в диалоге (студент-студент, студент-преподаватель, студент-сотрудник лаборатории).	Затрудняется в высказывании своей точки зрения	Умеет высказывать свою точку зрения и участвовать в диалоге со специалистами различного уровня
<b>ПК-4.4.</b> Владеть навыками участия в многосторонней научной беседе, используя в устной речи специфическую химическую терминологию	Владеть: навыками участия в многосторонней научной беседе, используя в устной речи специфическую химическую терминологию	Затрудняется в использовании терминологии	Владеет навыками участия в научной беседе, свободно использует специфическую химическую терминологию

Код и формулировка компетенции **ПК-6.** способностью определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения, брать на себя ответственность за результат деятельности

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения	
		«Не зачтено»	«Зачтено»
<b>ПК-6.1.</b> Знать основные возможные проблемы своей профессиональной деятельности	Знать: основные возможные проблемы своей профессиональной деятельности	Затрудняется в формулировании возможных проблем	Знает основные возможные проблемы своей профессиональной деятельности
<b>ПК-6.2.</b> Знать пути решения возникающих проблем	Знать: пути решения возникающих проблем	Затрудняется в формулировании путей решения возникающих проблем	Знает пути решения возникающих проблем
<b>ПК-6.3.</b> Уметь выявлять возникающие проблемы и осуществлять их разбор с целью поиска путей их решения	Уметь: выявлять возникающие проблемы и осуществлять их разбор с целью поиска путей их решения	Затрудняется в выявлении возникающих проблем	Умеет выявлять возникающие проблемы и осуществлять их разбор с целью поиска путей их решения
<b>ПК-6.4.</b> Уметь выделять главные проблемы при исполнении своей профессиональной деятельности	Уметь: выделять главные проблемы при исполнении своей профессиональной деятельности	Затрудняется в выделении главных проблем	Уметь выделять главные проблемы при исполнении своей профессиональной деятельности
<b>ПК-6.5.</b> Владеть способностью к определению и анализу проблем, возникающих при исполнении своей профессиональной деятельности	Владеть: способностью к определению и анализу проблем, возникающих при исполнении своей профессиональной деятельности	Затрудняется в определении возникающих проблем	Владеет способностью к определению и анализу проблем, возникающих при исполнении своей профессиональной деятельности

## КАРТА КОМПЕТЕНЦИИ

Код и формулировка компетенции **ПК-7**. владением методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения	
		«Не зачтено»	«Зачтено»
<b>ПК-7.1.</b> Знать основную литературу по методике преподавания химии, проведению экспериментальных работ.	Знать: основную литературу по методике преподавания химии, проведению экспериментальных работ.	Не способен грамотно подобрать основную литературу по методике преподавания химии, проведению экспериментальных работ.	Знает основную литературу по методике преподавания химии, проведению экспериментальных работ
<b>ПК-7.2.</b> Уметь правильно составлять конспект лекций, определять главные положения изложения предмета.	Уметь: правильно составлять конспект лекций, определять главные положения изложения предмета.	Не способен грамотно составлять конспект лекций, определять главные положения изложения предмета.	Умеет правильно составлять конспект лекций, определять главные положения изложения предмета.
<b>ПК-7.3.</b> Уметь на основе учебной литературы выделять главное и использовать эти сведения для объяснения результатов практических работ, обладать навыками подбора и решения задач для проведения семинарских занятий	Уметь: на основе учебной литературы выделять главное и использовать эти сведения для объяснения результатов практических работ, обладать навыками подбора и решения задач для проведения семинарских занятий	Не способен грамотно на основе учебной литературы выделять главное и использовать эти сведения для объяснения результатов практических работ, обладать навыками подбора и решения задач для проведения семинарских занятий.	Умеет на основе учебной литературы выделять главное и использовать эти сведения для объяснения результатов практических работ, обладать навыками подбора и решения задач для проведения семинарских занятий.
<b>ПК-7.4.</b> Владеть навыками в отборе материала для проведения практических занятий и	Владеть: навыками в отборе материала для проведения практических занятий и лабораторных работ по результатам анализа литературных данных.	Не способен грамотно отбирать материал для проведения практических занятий и лабораторных работ по результатам анализа	Способен грамотно отобрать материал для проведения практических занятий и лабораторных работ

лабораторных работ по результатам анализа литературных данных.		литературных данных.	по результатам анализа литературных данных.
--	--	----------------------	---

**4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценивания результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине**

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Оценочные средства
ПК-1.1. Знать научную новизну и важность практического использования данных, полученных при выполнении магистерской диссертации.	Знать: научную новизну и важность практического использования данных, полученных при выполнении магистерской диссертации.	Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет
ПК-1.2. Знать основную литературу по тематике исследования, преимущества и недостатки теоретических и экспериментальных методов используемых в НИР.	Знать: основную литературу по тематике исследования, преимущества и недостатки теоретических и экспериментальных методов используемых в НИР.	
ПК-1.3. Уметь на основе литературы выделять и использовать для объяснения результатов НИР теоретическую основу экспериментальных методов синтеза и анализа	Уметь: на основе литературы выделять и использовать для объяснения результатов НИР теоретическую основу экспериментальных методов синтеза и анализа	
ПК-1.4 Уметь правильно составлять конспект статьи/книги, определять главные положения предшествующих работ по данной тематике	Уметь: правильно составлять конспект статьи/книги, определять главные положения предшествующих работ по данной тематике	
ПК-1.5 Владеть начальными навыками в формулировке тематики НИР по результатам первичного анализа литературных данных в выбранной области исследований.	Владеть: начальными навыками в формулировке тематики НИР по результатам первичного анализа литературных данных в выбранной области исследований.	
ПК-1.6 Владеть навыками экспериментальных и теоретических работ и по теме НИР магистерской диссертации	Владеть: навыками экспериментальных и теоретических работ и по теме НИР магистерской диссертации	
ПК-3.1. Знать оборудование и программы предназначенные для проведения синтеза и исследование различных ФХ свойств веществ.	Знать: оборудование и программы предназначенные для проведения синтеза и исследование различных ФХ свойств веществ.	Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет
ПК-3.2. Уметь проводить эксперимент на научном оборудовании, проводить обработку результатов и измерений с использованием специализированных компьютерных программ.	Уметь: проводить эксперимент на научном оборудовании, проводить обработку результатов и измерений с использованием специализированных компьютерных программ.	
ПК-3.3. Владеть основами пробоподготовки для проведения различных ФХА.	Владеть: основами пробоподготовки для проведения различных ФХА.	
ПК-3.4. Владеть начальными навыками работы со специализированным научным оборудованием	Владеть: начальными навыками работы со специализированным научным оборудованием	
ПК-4.1. Знать основные правила ведения	Знать: основные правила ведения	Письменная работа

научной дискуссии	научной дискуссии	на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет
ПК-4.2. Знать основные требования к стендовым/устным докладам при представлении полученных результатов НИР	Знать: Основные требования к стендовым/устным докладам при представлении полученных результатов НИР	
ПК-4.3. Уметь высказывать свою точку зрения и участвовать в диалоге (студент-студент, студент-преподаватель, студент-сотрудник лаборатории).	Уметь: высказывать свою точку зрения и участвовать в диалоге (студент-студент, студент-преподаватель, студент-сотрудник лаборатории).	
ПК-4.4. Владеть навыками участия в многосторонней научной беседе, используя в устной речи специфическую химическую терминологию	Владеть: навыками участия в многосторонней научной беседе, используя в устной речи специфическую химическую терминологию	
ПК-6.1. Знать основные возможные проблемы своей профессиональной деятельности	Знать: основные возможные проблемы своей профессиональной деятельности	Письменная работа на занятии, индивидуальный, групповой опрос, зачет
ПК-6.2. Знать пути решения возникающих проблем	Знать: пути решения возникающих проблем	
ПК-6.3. Уметь выявлять возникающие проблемы и осуществлять их разбор с целью поиска путей их решения	Уметь: выявлять возникающие проблемы и осуществлять их разбор с целью поиска путей их решения	
ПК-6.4. Уметь выделять главные проблемы при исполнении своей профессиональной деятельности	Уметь: выделять главные проблемы при исполнении своей профессиональной деятельности	
ПК-6.4. Владеть способностью к определению и анализу проблем, возникающих при исполнении своей профессиональной деятельности	Владеть: способностью к определению и анализу проблем, возникающих при исполнении своей профессиональной деятельности	
ПК-7.1. Знать основную литературу по методике преподавания химии, проведению экспериментальных работ.	Знать: основную литературу по методике преподавания химии, проведению экспериментальных работ.	
ПК-7.2. Уметь правильно составлять конспект лекций, определять главные положения изложения предмета.	Уметь: правильно составлять конспект лекций, определять главные положения изложения предмета.	
ПК-7.3. Уметь на основе учебной литературы выделять главное и использовать эти сведения для объяснения результатов практических работ, обладать навыками подбора и решения задач для проведения семинарских занятий	Уметь: на основе учебной литературы выделять главное и использовать эти сведения для объяснения результатов практических работ, обладать навыками подбора и решения задач для проведения семинарских занятий	
ПК-7.4. Владеть навыками в отборе материала для проведения практических занятий и лабораторных работ по результатам анализа литературных данных.	Владеть: навыками в отборе материала для проведения практических занятий и лабораторных работ по результатам анализа литературных данных.	

### Вопросы для индивидуального / группового опроса и коллоквиума

**Вопросы к занятию 1.** Измерения и обработка измерений. Теория ошибок. Учет систематических погрешностей: поправочные коэффициенты. Статистический учет случайных погрешностей. Дисперсия и средняя квадратическая погрешность. Доверительный интервал и доверительная вероятность. Критерий Стьюдента. Учет промахов. Метод  $\sigma$ . Метод относительного уклонения. Уровень значимости.

**Вопрос к занятию 2.** Регрессионный анализ. Физико-химические дескрипторы и их расчет. Корреляционные соотношения в органической химии. Важнейшие соотношения и

постулаты: принцип линейного соотношения свободных энергий, постулат Хэммонда, принцип Поляни-Семенова.

**Вопросы к занятию 3.** Уравнение Гаммета, его достоинства и недостатки. Уравнение Тафта. Взаимосвязь различных шкал заместителей. Учет стерического эффекта. Множественные корреляции.

**Вопросы к занятию 4.** Математический аппарат при моделировании кинетических процессов. Кинетический анализ сложных химических реакций. Скорость и механизм химической реакции. Кинетическое уравнение его дифференциальная и интегральная форма, порядок химической реакции. Сложные процессы: обратимые, параллельные и последовательные реакции. Квазиравновесное и квазистационарное приближения в кинетике сложных реакций. Лимитирующая стадия. Кинетический анализ сложных реакций. Прямая и обратная кинетические задачи. Примеры

**Вопросы к занятию 5. Аддитивные методы расчета физико-химических свойств органических молекул.**

Принцип аддитивности. Его применение в различных областях химии. Обоснование применимости метода аддитивности.

Метод аддитивности термодинамических вкладов Бенсона. Термодинамическая группа. Типы центральных атомов и лигандов. Примеры простых расчетов. Невалентные взаимодействия, их классификация и учет в методе Бенсона. Расчет изобарной теплоемкости и энтропии органических соединений. Число симметрии. Расчеты энтальпии образования для произвольной температуры.

**Вопросы к занятию 6. Сравнительные методы расчета.**

Метод гомологических рядов.

Соотношения между энтальпиями образования различных гомологических рядов. Примеры простых соотношений. Вывод уравнений множественной регрессии и конкретные примеры.

**Вопросы к занятию 7.** Метод изодесмических реакций. Принцип подобия в термодинамических расчетах. Изодесмические реакции. Реакции разделения связей и их формальный подбор. Гомодесмические реакции. Величина теплового эффекта гомодесмической реакции как критерий стабилизации/дестабилизации участников реакции. Методы подбора гомодесмических реакций. Обмен заместителями. Макроинкрементирование. Реакции разделения групп. Примеры.

**Вопросы к занятию 8. Математический аппарат квантовой химии.**

Основы квантовохимической теории. Уравнение Шредингера для атомов и молекул.

Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Электронное волновое уравнение. Электронная плотность и ее изменения при переходе от разделенных атомов к молекуле.

Построение приближенных решений электронного волнового уравнения на основе вариационного принципа. Одноэлектронное приближение. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока (самосогласованного поля, ССП). Детерминант Слэтера. Понятие о закрытых и открытых оболочках.

**Вопросы к занятию 9.** Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). Наиболее распространенные типы базисов атомных орбиталей: орбитали слейтеровского и гауссова типа. Минимальные и валентно-расщепленные базисные наборы. Поляризационные и диффузные функции. Метод ССП МО ЛКАО.

**Вопросы к занятию 10.** Вычислительные методы квантовой химии.



Полуэмпирические методы квантовой химии. Методы, использующие пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрыванием: MNDO, AM1, PM3. Возможности и ограничения применения полуэмпирических методов квантовой химии. Применение полуэмпирических методов к расчету различных свойств органических молекул.

**Вопросы к занятию 11.** Коррелированное движение электронов. Учет энергии электронной корреляции. Понятие о методах конфигурационного взаимодействия, объединенных кластеров. Основные понятия метода теории возмущений, теория Меллера-Плессе. Сравнительная характеристика методов учета корреляционной энергии. Теория функционала плотности, основные понятия. Метод Кона-Шэма. Различные виды корреляционных и обменных функционалов. Гибридные методы.

**Вопросы к занятию 12.** Расчет свойств органических молекул.

Полное конфигурационное взаимодействие. Совершенный базисный набор. Ограничения, вызванные усложнением метода расчета.

Компромиссные подходы. Метод изодесмических реакций в сочетании со сложным методом квантовохимического расчета. Семейство методов CBS и их отдельные представители: CBS-APNO, CBS-Q3 и др. Семейство композитных методов Gaussian. Метод G1. Его недостатки и их учет в методе G2. Упрощение метода: процедуры G2MP2, G2M(RCC) и другие. Методы G3 и G4.



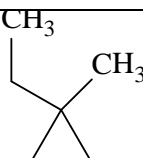
**Критерии оценки индивидуального и группового опроса:**

- «не зачтено» выставляется студенту, если студент не имеет представления об обсуждаемом вопросе или имеет о нем фрагментарные представления;
- «зачтено» выставляется студенту, если студент имеет сформированные представления об обсуждаемом вопросе, при этом допускаются отдельные пробелы в представления об обсуждаемом вопросе.

### Контрольная работа № 1.

#### Вариант №1


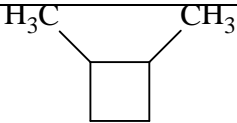
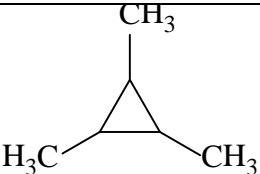
1. Для следующих углеводородов постройте молекулярный граф. Выпишите соответствующие матрицы смежности и матрицы топологических расстояний. Оцените разветвлённость структур с использованием индексов Хосойи, Рандича и Винера. Исходя из рассчитанных топологических индексов, укажите, какое из соединений будет иметь бóльшую температуру кипения. Почему? (атомами водорода при выполнении задания пренебречь) Результаты расчётов  $Z$ ,  $W$  и  $iR$  оформить в виде таблицы:

Соединение	$W$	$Z$	$iR$
			
			
			

2. Сравните сложность соединений по данным об информационной энтропии  $h$ . Расчёты  $h$  сопровождаются разбиением атомов по атомным типам. Укажите ожидаемое число сигналов в спектре  $^1\text{H}$  ЯМР приведённых соединений
- (а) уксусная кислота;  
 (б) метилформиат;  
 (в) гликолевый альдегид.
3. С использованием соотношения Пуанкаре–Хопфа оцените число связей, которые образует атом железа в молекуле ферроцена.
4. Укажите положение групп  $\text{CH}_3$  в молекуле ксилола, которому соответствует изомер с наибольшей информационной энтропией. Ответ обоснуйте расчётами соответствующих информационных индексов.
5. Когда более разветвлённые алканы характеризуются более высокими значениями информационной энтропии по сравнению с менее разветвлёнными изомерами (например, линейными изомерами)? Ответ обоснуйте соответствующими расчётами.

### Вариант №2

1. Для следующих углеводородов постройте молекулярный граф. Выпишите соответствующие матрицы смежности и матрицы топологических расстояний. Оцените разветвлённость структур с использованием индексов Хосойи, Рандича и Винера. Исходя из рассчитанных топологических индексов, укажите, какое из соединений будет иметь бóльшую температуру кипения. Почему? (атомами водорода при выполнении задания пренебречь) Результаты расчётов  $Z$ ,  $W$  и  $iR$  оформите в виде таблицы:

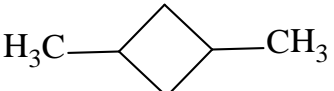
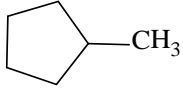
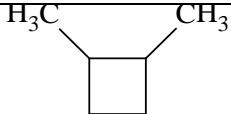
Соединение	$W$	$Z$	$iR$
			
			
			

2. Сравните сложность соединений по данным об информационной энтропии  $h$ . Расчёты  $h$  сопровождаются разбиением атомов по атомным типам. Укажите ожидаемое число сигналов в спектре  $^1\text{H}$  ЯМР приведённых соединений
- (а) ацетальдегид;  
 (б) этиленоксид;  
 (в) виниловый спирт.
3. С использованием соотношения Пуанкаре–Хопфа оцените число связей, которые образует атом железа в молекуле ферроцена.

- Укажите положение групп OH в молекуле диоксибензола  $C_6H_4(OH)_2$ , которому соответствует изомер с наибольшей информационной энтропией. Ответ обоснуйте расчётами соответствующих информационных индексов.
- Когда более разветвлённые алканы характеризуются более высокими значениями информационной энтропии по сравнению с менее разветвлёнными изомерами (например, линейными изомерами)? Ответ обоснуйте соответствующими расчётами.

### Вариант №3

- Для следующих углеводородов постройте молекулярный граф. Выпишите соответствующие матрицы смежности и матрицы топологических расстояний. Оцените разветвлённость структур с использованием индексов Хосойи, Рандича и Винера. Исходя из рассчитанных топологических индексов, укажите, какое из соединений будет иметь бóльшую температуру кипения. Почему? (атомами водорода при выполнении задания пренебречь) Результаты расчётов  $Z$ ,  $W$  и  $iR$  оформить в виде таблицы:

Соединение	$W$	$Z$	$iR$
			
			
			

- Сравните сложность соединений по данным об информационной энтропии  $h$ . Расчёты  $h$  сопровождаются разбиением атомов по атомным типам. Укажите ожидаемое число сигналов в спектре  $^1H$  ЯМР приведённых соединений
  - метилформиат;
  - этилформиат;
  - $n$ -пропилформиат
- С использованием соотношения Пуанкаре–Хопфа оцените число связей, которые образует атом железа в молекуле ферроцена.
- Укажите положение групп OH в молекуле диоксибензола  $C_6H_4(OH)_2$ , которому соответствует изомер с наибольшей информационной энтропией. Ответ обоснуйте расчётами соответствующих информационных индексов.
- Когда более разветвлённые алканы характеризуются более высокими значениями информационной энтропии по сравнению с менее разветвлёнными изомерами (например, линейными изомерами)? Ответ обоснуйте соответствующими расчётами.

### Вариант №4

- Для следующих углеводородов постройте молекулярный граф. Выпишите соответствующие матрицы смежности и матрицы топологических расстояний. Оцените разветвлённость структур с использованием индексов Хосойи, Рандича и Винера. Исходя из рассчитанных топологических индексов, укажите, какое из соединений будет иметь бóльшую температуру кипения. Почему? (атомами водорода при выполнении задания пренебречь) Результаты расчётов  $Z$ ,  $W$  и  $iR$  оформить в виде таблицы:

Соединение	W	Z	$i_R$

2. Сравните сложность соединений по данным об информационной энтропии  $h$ . Расчёты  $h$  сопровождаются разбиением атомов по атомным типам. Укажите ожидаемое число сигналов в спектре  $^1H$  ЯМР приведённых соединений

- (а) метанол;  
(б) этанол;  
(в) *n*-пропанол

3. С использованием соотношения Пуанкаре–Хопфа оцените число связей, которые образует атом хрома в молекуле дибензолхрома.
4. Укажите положение групп OH в молекуле диоксибензола  $C_6H_4(OH)_2$ , которому соответствует изомер с наибольшей информационной энтропией. Ответ обоснуйте расчётами соответствующих информационных индексов.
5. Когда более разветвлённые алканы характеризуются более высокими значениями информационной энтропии по сравнению с менее разветвлёнными изомерами (например, линейными изомерами)? Ответ обоснуйте соответствующими расчётами.

### Вариант №5

1. Для следующих углеводородов постройте молекулярный граф. Выпишите соответствующие матрицы смежности и матрицы топологических расстояний. Оцените разветвлённость структур с использованием индексов Хосойи, Рандича и Винера. Исходя из рассчитанных топологических индексов, укажите, какое из соединений будет иметь бóльшую температуру кипения. Почему? (атомами водорода при выполнении задания пренебречь) Результаты расчётов  $Z$ ,  $W$  и  $iR$  оформить в виде таблицы:

Соединение	W	Z	$i_R$





2. Сравните сложность соединений по данным об информационной энтропии  $h$ . Расчёты  $h$  сопровождаются разбиением атомов по атомным типам. Укажите ожидаемое число сигналов в спектре  $^1\text{H}$  ЯМР приведённых соединений

- (а) метанол;  
 (б) этанол;  
 (в)  $n$ -пропанол

3. С использованием соотношения Пуанкаре–Хопфа оцените число связей, которые образует атом хрома в молекуле дибензолхрома.
4. Укажите положение групп  $\text{OH}$  в молекуле диоксибензола  $\text{C}_6\text{H}_3(\text{OH})_3$ , которому соответствует изомер с наибольшей информационной энтропией. Ответ обоснуйте расчётами соответствующих информационных индексов.
5. Когда более разветвлённые алканы характеризуются более высокими значениями информационной энтропии по сравнению с менее разветвлёнными изомерами (например, линейными изомерами)? Ответ обоснуйте соответствующими расчётами.

### Вариант №6

1. Для следующих углеводородов постройте молекулярный граф. Выпишите соответствующие матрицы смежности и матрицы топологических расстояний. Оцените разветвлённость структур с использованием индексов Хосойи, Рандича и Винера. Исходя из рассчитанных топологических индексов, укажите, какое из соединений будет иметь бóльшую температуру кипения. Почему? (атомами водорода при выполнении задания пренебречь) Результаты расчётов  $Z$ ,  $W$  и  $iR$  оформить в виде таблицы:

Соединение	$W$	$Z$	$iR$
			
			
			
			




2. Сравните сложность соединений по данным об информационной энтропии  $h$ . Расчёты  $h$  сопровождаются разбиением атомов по атомным типам. Укажите ожидаемое число сигналов в спектре  $^1\text{H}$  ЯМР приведённых соединений

- (а)  $\text{HCNO}$ ;  
 (б)  $\text{HNCO}$ ;  
 в)  $\text{HOCN}$

3. С использованием соотношения Пуанкаре–Хопфа оцените число связей, которые образует атом хрома в молекуле дибензолхрома.
4. Укажите положение групп  $\text{OH}$  в молекуле диоксибензола  $\text{C}_6\text{H}_3(\text{OH})_3$ , которому соответствует изомер с наибольшей информационной энтропией. Ответ обоснуйте расчётами соответствующих информационных индексов.
5. Когда более разветвлённые алканы характеризуются более высокими значениями информационной энтропии по сравнению с менее разветвлёнными изомерами (например, линейными изомерами)? Ответ обоснуйте соответствующими расчётами.

### Вариант №7

1. Для следующих углеводородов постройте молекулярный граф. Выпишите соответствующие матрицы смежности и матрицы топологических расстояний. Оцените разветвлённость структур с использованием индексов Хосойи, Рандича и Винера. Исходя из рассчитанных топологических индексов, укажите, какое из соединений будет иметь бóльшую температуру кипения. Почему? (атомами водорода при выполнении задания пренебречь) Результаты расчётов  $Z$ ,  $W$  и  $iR$  оформить в виде таблицы:

Соединение	$W$	$Z$	$iR$
			
			
			

2. Сравните сложность соединений по данным об информационной энтропии  $h$ . Расчёты  $h$  сопровождаются разбиением атомов по атомным типам. Укажите ожидаемое число сигналов в спектре  $^1H$  ЯМР приведённых соединений

(а) тетраэдран  $C_4H_4$ ;

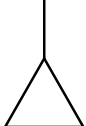
(б) кубан  $C_8H_8$ ;

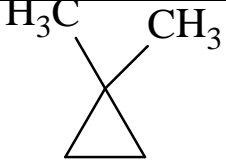
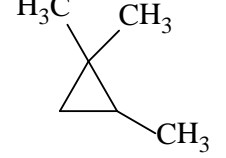
(в) призма  $C_6H_6$ .

3. С использованием соотношения Пуанкаре–Хопфа оцените число связей, которые образует атом хрома в молекуле дибензолхрома.
4. Укажите положение групп  $OH$  в молекуле диоксибензола  $C_6H_2(OH)_2$ , которому соответствует изомер с наибольшей информационной энтропией. Ответ обоснуйте расчётами соответствующих информационных индексов.
5. Когда более разветвлённые алканы характеризуются более высокими значениями информационной энтропии по сравнению с менее разветвлёнными изомерами (например, линейными изомерами)? Ответ обоснуйте соответствующими расчётами.

### Вариант №8

1. Для следующих углеводородов постройте молекулярный граф. Выпишите соответствующие матрицы смежности и матрицы топологических расстояний. Оцените разветвлённость структур с использованием индексов Хосойи, Рандича и Винера. Исходя из рассчитанных топологических индексов, укажите, какое из соединений будет иметь бóльшую температуру кипения. Почему? (атомами водорода при выполнении задания пренебречь) Результаты расчётов  $Z$ ,  $W$  и  $iR$  оформить в виде таблицы:

Соединение	$W$	$Z$	$iR$
$CH_3$ 			

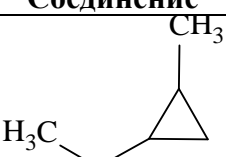
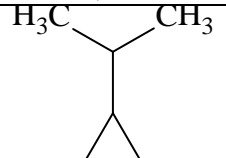
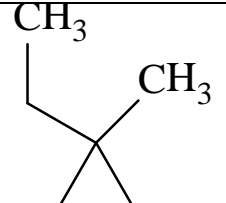
2. Сравните сложность соединений по данным об информационной энтропии  $h$ . Расчёты  $h$  сопровождаются разбиением атомов по атомным типам. Укажите ожидаемое число сигналов в спектре  $^1\text{H}$  ЯМР приведённых соединений

- (а) бензвален;  
 (б) бензол;  
 (в) фульвен.

3. С использованием соотношения Пуанкаре–Хопфа оцените число связей, которые образует атом хрома в молекуле дибензолхрома.
4. Укажите положение групп  $\text{OH}$  в молекуле диоксибензола  $\text{C}_6\text{H}_2(\text{OH})_2$ , которому соответствует изомер с наибольшей информационной энтропией. Ответ обоснуйте расчётами соответствующих информационных индексов.
5. Когда более разветвлённые алканы характеризуются более высокими значениями информационной энтропии по сравнению с менее разветвлёнными изомерами (например, линейными изомерами)? Ответ обоснуйте соответствующими расчётами.

### Вариант №9

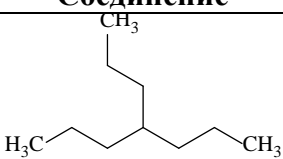
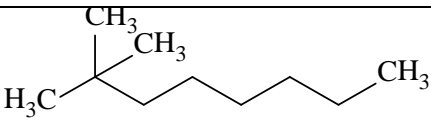
1. Для следующих углеводородов постройте молекулярный граф. Выпишите соответствующие матрицы смежности и матрицы топологических расстояний. Оцените разветвлённость структур с использованием индексов Хосойи, Рандича и Винера. Исходя из рассчитанных топологических индексов, укажите, какое из соединений будет иметь большую температуру кипения. Почему? (атомами водорода при выполнении задания пренебречь) Результаты расчётов  $Z$ ,  $W$  и  $iR$  оформить в виде таблицы:

Соединение	$W$	$Z$	$iR$
			
			
			

2. Сравните сложность соединений по данным об информационной энтропии  $h$ . Расчёты  $h$  сопровождаются разбиением атомов по атомным типам. Укажите ожидаемое число сигналов в спектре  $^1\text{H}$  ЯМР приведённых соединений
- (а) бензвален;  
 (б) бензол;  
 (в) фульвен.
3. С использованием соотношения Пуанкаре–Хопфа оцените число связей, которые образует атом железа в молекуле ферроцена?
4. Укажите положение групп  $\text{CH}_3$  в молекуле ксилола, которому соответствует изомер с наибольшей информационной энтропией. Ответ обоснуйте расчётами соответствующих информационных индексов.
5. Когда более разветвлённые алканы характеризуются более высокими значениями информационной энтропии по сравнению с менее разветвлёнными изомерами (например, линейными изомерами)? Ответ обоснуйте соответствующими расчётами.

### Вариант №10

1. Для следующих углеводородов постройте молекулярный граф. Выпишите соответствующие матрицы смежности и матрицы топологических расстояний. Оцените разветвлённость структур с использованием индексов Хосойи, Рандича и Винера. Исходя из рассчитанных топологических индексов, укажите, какое из соединений будет иметь большую температуру кипения. Почему? (атомами водорода при выполнении задания пренебречь) Результаты расчётов  $Z$ ,  $W$  и  $iR$  оформить в виде таблицы:

Соединение	$W$	$Z$	$iR$
			
			

2. Сравните сложность соединений по данным об информационной энтропии  $h$ . Расчёты  $h$  сопровождаются разбиением атомов по атомным типам. Укажите ожидаемое число сигналов в спектре  $^1\text{H}$  ЯМР приведённых соединений
- (а) малеиновый ангидрид;  
 (б) фуран;  
 (в) аддукт малеинового ангидрида и фурана (продукт Дильса-Альдера).
3. С использованием соотношения Пуанкаре–Хопфа оцените число связей, которые образует атом железа в молекуле ферроцена?
4. Укажите положение групп  $\text{CH}_3$  в молекуле ксилола, которому соответствует изомер с наибольшей информационной энтропией. Ответ обоснуйте расчётами соответствующих информационных индексов.
5. Когда более разветвлённые алканы характеризуются более высокими значениями информационной энтропии по сравнению с менее разветвлёнными изомерами (например, линейными изомерами)? Ответ обоснуйте соответствующими расчётами.

**Критерии оценки контрольной работы:**



- «не зачтено» выставляется студенту, если студент выполнил каждое из заданий на 70% и ниже;
- «зачтено» выставляется студенту, если студент выполнил каждое из заданий как минимум на 70% и выше.

#### **а. Рейтинг-план дисциплины (при необходимости)**

Модульно-рейтинговая система при обучении в магистратуре не применяется, поэтому рейтинг-план дисциплины не составлялся.

### **5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины**

#### **5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины**

##### **Основная литература:**

1. Вершинин, В.И. Аналитическая химия [Электронный ресурс] : учебник / В.И. Вершинин, И.В. Власова, И.А. Никифорова. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2017. — 428 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/97670>. — Загл. с экрана.
2. Воскобойников, Ю.Е. Регрессионный анализ данных в пакете MATHCAD [Электронный ресурс] : учебное пособие / Ю.Е. Воскобойников. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2011. — 224 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/666>. — Загл. с экрана.
3. Буданов, В.В. Химическая кинетика [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.В. Буданов, Т.Н. Ломова, В.В. Рыбкин. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2014. — 288 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/42196>. — Загл. с экрана.
4. Колпакова, Н.А. Сборник задач по химической кинетике [Электронный ресурс] : учебное пособие / Н.А. Колпакова, С.В. Романенко, В.А. Колпаков. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2018. — 280 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/105991>. — Загл. с экрана.
5. Боровлев, И.В. Органическая химия: термины и основные реакции [Электронный ресурс] : учебное пособие / И.В. Боровлев. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2015. — 362 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/70742>. — Загл. с экрана.
6. Реутов, О.А. Органическая химия. В 4 ч. Часть 1 [Электронный ресурс] : учебник / О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 570 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94167>. — Загл. с экрана. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия [Электронный ресурс] / В.И. Барановский. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2017. — 428 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/92941>. — Загл. с экрана.
7. Майер И., Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул [Электронный ресурс] : учебное пособие / Майер И. ; под ред. А. Л. Чугреева ; пер. с англ. М. Б. Дарховского, А. М. Токмачева. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 387 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94102>. — Загл. с экрана.
8. Демидович, Б.П. Математические основы квантовой механики [Электронный ресурс] : учебное пособие / Б.П. Демидович. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург

- : Лань, 2005. — 200 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/604>. — Загл. с экрана.
9. Крашенинин В.И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам [Электронный ресурс] / В.И. Крашенинин ; Е.Г. Газенаур ; Л.В. Кузьмина .— Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2012 .— 56 с. — Режим доступа: [http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+1160+default+9+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus](http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+1160+default+9+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus;); [:http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678](http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678)>.

#### Дополнительная литература:

10. Квантовохимическое моделирование органических молекул и реакций. Выбор приближения. [Электронный ресурс]: учеб. пособие / И.В. Вакулин [и др.]; Башкирский государственный университет. — Уфа: РИЦ БашГУ, 2015. — Электрон. версия печ. публикации. — Доступ возможен через Электронную библиотеку БашГУ. — <URL:[https://elib.bashedu.ru/dl/read/Vakulin\\_Latypova\\_Talipov\\_Kvantovohimicheskoe\\_modelirovanie\\_up\\_2015.pdf](https://elib.bashedu.ru/dl/read/Vakulin_Latypova_Talipov_Kvantovohimicheskoe_modelirovanie_up_2015.pdf)>.
11. Еремин, В.В. Основы физической химии. Теория. В 2 ч [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.В. Еремин, С.И. Каргов, И.А. Успенская, Н.Е. Кузьменко. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2015. — 589 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/84118>. — Загл. с экрана.
12. Реутов, О.А. Органическая химия. В 4 ч. Часть 1 [Электронный ресурс] : учебник / О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 570 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94167>. — Загл. с экрана.
13. Юровская, М.А. Основы органической химии [Электронный ресурс] : учебное пособие / М.А. Юровская, А.В. Куркин. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2015. — 239 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/66365>. — Загл. с экрана.
14. Син, Т. Занимательная статистика. Регрессионный анализ. Манга [Электронный ресурс] / Т. Син. — Электрон. дан. — Москва : ДМК Пресс, 2014. — 214 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/90123>. — Загл. с экрана.
15. Ю.И. Бродский. Лекции по математическому и имитационному моделированию Москва ; Берлин : Директ-Медиа, 2015. 240 с. Режим доступа: [http://biblioclub.ru/index.php?page=book\\_red&id=429702&sr=1](http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=429702&sr=1).
16. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.Г. Цирельсон. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 522 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94104>. — Загл. с экрана.

#### 5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. Электронная библиотечная система «ЭБ БашГУ» - <https://elib.bashedu.ru/>
2. Электронная библиотечная система «Университетская библиотека онлайн» - <https://biblioclub.ru/>

3. Электронная библиотечная система издательства «Лань» - <https://e.lanbook.com/>
4. Электронный каталог Библиотеки БашГУ - <http://www.bashlib.ru/catalogi/>
5. Универсальная Базы данных EastView (доступ к электронным научным журналам) - <https://dlib.eastview.com/browse>
6. Научная электронная библиотека - elibrary.ru (доступ к электронным научным журналам) - [https://elibrary.ru/projects/subscription/rus\\_titles\\_open.asp](https://elibrary.ru/projects/subscription/rus_titles_open.asp)
7. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные
8. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные
9. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г. Срок действия лицензии до 25.09.2019
10. Linux OpenSUSE 12.3 (x84\_64) GNU General Public License
11. Система централизованного тестирования БашГУ (Moodle). Универсальная общественная лицензия GNU

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

Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
<p><b>1. учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа:</b> аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус)</p> <p><b>2. учебные аудитории для проведения занятий семинарского типа:</b> аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус), аудитория № 001 (химфак корпус), аудитория № 002 (химфак корпус), аудитория № 006 (химфак корпус), аудитория № 007 (химфак корпус), аудитория № 008 (химфак корпус)</p> <p><b>3. учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций:</b> аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус), аудитория № 001 (химфак корпус), аудитория № 002 (химфак корпус), аудитория № 006 (химфак корпус), аудитория № 007 (химфак корпус), аудитория № 008 (химфак корпус)</p> <p><b>4. учебная аудитория для текущего контроля и промежуточной аттестации:</b> аудитория № 405 (химфак корпус), аудитория №311 (химфак корпус), аудитория № 310 (химфак корпус), аудитория № 305 (химфак корпус), аудитория № 001 (химфак корпус), аудитория № 002 (химфак корпус)</p>	<p style="text-align: center;"><b>Аудитория № 405</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi XD3200U, экран с электроприводом 300*400см Spectra Classic</p> <p style="text-align: center;"><b>Аудитория № 311</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, проектор Mitsubishi XD 600U, экран с электроприводом Projecta 183*240см Matte white</p> <p style="text-align: center;"><b>Аудитория № 310</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p> <p style="text-align: center;"><b>Аудитория № 305</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST, экран настенный Classic Norma 244*183</p> <p style="text-align: center;"><b>Аудитория № 001</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p style="text-align: center;"><b>Аудитория № 002</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p style="text-align: center;"><b>Аудитория № 006</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p style="text-align: center;"><b>Аудитория № 007</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p style="text-align: center;"><b>Аудитория № 008</b> Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска</p> <p style="text-align: center;"><b>Читальный зал № 1</b> Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 76.</p> <p style="text-align: center;"><b>Читальный зал №2</b> Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок), подключенных к сети Интернет, – 8 шт., неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 50.</p> <p style="text-align: center;"><b>Читальный зал № 5</b> Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 3 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 27.</p> <p style="text-align: center;"><b>Читальный зал № 6</b></p>	<p>1. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии бессрочные</p> <p>2. Microsoft Office Standard 2013 Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г. Лицензии бессрочные</p> <p>3. Kaspersky Endpoint Security для бизнеса - Стандартный. Договор №31806820398 от 17.09.2018 г. Срок действия лицензии до 25.09.2019</p> <p>4. Система централизованного тестирования БашГУ (Moodle). Универсальная общественная лицензия GNU</p> <p>5. Linux OpenSUSE</p>

<p>корпус), аудитория № 006 (химфак корпус), аудитория № 007 (химфак корпус), аудитория № 008 (химфак корпус), аудитория № 004 (химфак корпус), аудитория № 005 (химфак корпус).</p> <p><b>5. помещения для самостоятельной работы:</b>  читальный зал № 1 (главный корпус), читальный зал №2 (физмат корпус-учебное), читальный зал № 5 (гуманитарный корпус), читальный зал № 6 (учебный корпус), читальный зал № 7 (гуманитарный корпус), лаборатория № 418 (химфак корпус)</p> <p><b>6. помещение для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования:</b> аудитория № 405 (химфак корпус).</p>	<p>Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 6 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 30.</p> <p><b>Читальный зал № 7</b>  Научный и учебный фонд, научная периодика, ПК (моноблок) - 5 шт, неограниченный доступ к ЭБС и БД; количество посадочных мест – 18.</p> <p><b>Аудитория № 004</b>  Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, коммутатор HP V1410-24G, персональный компьютер Lenovo ThinkCentre A70z Intel Pentium E 5800, 320 Gb, 19" - 15 шт, шкаф настенный TLK6U.</p> <p><b>Аудитория № 005</b>  Учебная мебель, учебно-наглядные пособия, доска, компьютер DEPO Neos 470 MDi5_3450/4GDDR/T500 G/DVD+R и монитор ViewSonic 21.5 - 13 шт, шкаф TLK TWP-065442-G-GY, шкаф монтажный NT PRACTIC 2MP47-610B/SSt450/ SKS1/SSt750,59560, 00 T.316-14, шкаф настенный TLK6U.</p> <p><b>Лаборатория № 418</b>  Учебная мебель, факсимильным аппарат Panasonic KX-FL423RUB – 2 шт., эН-метр рН-150МИ (с гос. поверкой), автотрансформатор TDGC2-0.5K(0,5kBT; 2A,220/0-250В),3604, 99р Т.207/2-15, весы "Ohaus" PA64C (65г, 0,1мг) с поверкой, весы VIC-1500d1 (1500г. 100МГ, внешн.калибровка) ACCULAB, иономер И-160МИ с поверкой, комплекс вольтамперометрический СТА, компьютер в комплекте DEPO Neos 4601\Ю/монитор 20" Samsung VX2035/кпав./мышь, компьютер персональный №1 т.210-14/3, магнитная мешалка без нагрева Tolorino – 2шт, магнитная мешалка с нагревом и нанокерамич.поверх hG-MAG HS, метр-рН рН-150МИ (с гос.поверкой), монитор 19" LG L1919S BF Black (LCD&lt;TFT,8ms, 1280*1024,250КД/М.1 400:1,4:3 D-Sub), персональный компьютер в составе с/блок/Core J7-4770 (3.4)/H87/SYGA/HDD 500Gb, монитор ЖК"20"Вепс1.клавиат ура+мышь, принтер Canon i-SENSYS MF3010, рН-метр рН-150МИ с гос.поверкой, системный блок ПК (775), шкаф сушильный LOIP LF-25/350-GS1, (310X 310x310 мм б/вентилятора.нерж.сталь цифровой контролер), количество посадочных мест – 10.</p>	<p>12.3 (x84_64) GNU General Public License</p>
---	---	---

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

**СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ**

дисциплины «Методы математического моделирования в химии»  
на 1 семестр  
очная  
форма обучения

Вид работы	Объем дисциплины
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	3/108
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	26,2
лекций	12
практических/ семинарских	14
лабораторных	
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем)	0.2
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СРС) включая подготовку к экзамену/зачету	81,8
Контроль	

Форма(ы) контроля:  
Зачет 1 семестр

№ п/п	Тема и содержание	Форма изучения материалов: лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа и трудоемкость (в часах)				Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам (номера из списка)	Задания по самостоятельной работе студентов	Форма текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
		ЛК	ПР/СЕМ	ЛР	СРС			
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	Измерения и обработка измерений. Теория ошибок. Учет систематических погрешностей: поправочные коэффициенты. Статистический учет случайных погрешностей. Дисперсия и средняя квадратическая погрешность. Доверительный интервал и доверительная вероятность. Критерий Стьюдента. Учет промахов. Метод пс. Метод относительного уклонения. Уровень значимости	1	1		7	[1-2, 14-15]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену	Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум
2	Регрессионный анализ. Физико-химические дескрипторы и их расчет. Корреляционные соотношения в органической химии. Важнейшие соотношения и постулаты: принцип линейного соотношения свободных энергий, постулат Хэммонда, принцип Поляни-Семенова. Множественные корреляции.	1	1		7	[1-2, 14-15]		Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум; контрольная работа
3	Уравнение Гаммета, его достоинства и недостатки. Уравнение Тафта. Взаимосвязь различных шкал заместителей. Учет стерического эффекта. Множественные корреляции	1	1		7	[5-6, 12-13]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение	Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум

							лабораторной работы, подготовка к экзамену	
4	<p>Математический аппарат при моделировании кинетических процессов. Кинетический анализ сложных химических реакций. Скорость и механизм химической реакции. Кинетическое уравнение его дифференциальная и интегральная форма, порядок химической реакции. Сложные процессы: обратимые, параллельные и последовательные реакции.</p> <p>Квазиравновесное и квазистационарное приближения в кинетике сложных реакций. Лимитирующая стадия. Кинетический анализ сложных реакций. Прямая и обратная кинетические задачи. Примеры.</p>	1	1		7	[3-4, 12]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену	Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум
5	<p>Принцип аддитивности. Его применение в различных областях химии. Обоснование применимости метода аддитивности.</p> <p>Метод аддитивности термодинамических вкладов Бенсона. Термодинамическая группа.</p> <p>Типы центральных атомов и лигандов.</p> <p>Примеры простых расчетов. Невалентные взаимодействия, их классификация и учет в методе Бенсона. Расчет изобарной теплоемкости и энтропии органических соединений. Число симметрии. Расчеты энтальпии образования для произвольной температуры</p>	1	1		7	[6, 12-13]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену	Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум
6	<p>Метод гомологических рядов.</p> <p>Соотношения между энтальпиями образования различных гомологических рядов. Примеры простых соотношений.</p>	1	1		7	[6, 12-13]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и	Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум



	Вывод уравнений множественной регрессии и конкретные примеры.						дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену	
7	<p>Метод изодесмических реакций. Принцип подобия в термодимических расчетах. Изодесмические реакции. Реакции разделения связей и их формальный подбор. Гомодесмические реакции. Величина теплового эффекта гомодесмической реакции как критерий стабилизации/дестабилизации участников реакции. Методы подбора гомодесмических реакций. Обмен заместителями. Макроинкрементирование. Реакции разделения групп. Примеры</p>	1	2		7	[16]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену	Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум
8	<p><b>Математический аппарат квантовой химии.</b></p> <p>Основы квантовохимической теории. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Электронное волновое уравнение. Электронная плотность и ее изменения при переходе от разделенных атомов к молекуле.</p> <p>Построение приближенных решений электронного волнового уравнения на основе вариационного принципа. Одноэлектронное приближение. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока (самосогласованного поля, ССП). Детерминант Слэтера. Понятие о закрытых и открытых оболочках.</p>	1	2		7	[7-11, 16]	Самостоятельное изучение рекомендуемой основной и дополнительной литературы, выполнение лабораторной работы, подготовка к экзамену	Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум

9	Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). Наиболее распространенные типы базисов атомных орбиталей: орбитали слейтеровского и гауссова типа. Минимальные и валентно-расщепленные базисные наборы. Поляризационные и диффузные функции. Метод ССП МО ЛКАО.	1	1		7	[7-11, 16]		Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум
10	Вычислительные методы квантовой химии. Полуэмпирические методы квантовой химии. Методы, использующие пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрытием: MNDO, AM1, PM3. Возможности и ограничения применения полуэмпирических методов квантовой химии. Применение полуэмпирических методов к расчету различных свойств органических молекул.	1	1		7	[7-11, 16]		Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум
11	Коррелированное движение электронов. Учет энергии электронной корреляции. Понятие о методах конфигурационного взаимодействия, объединенных кластеров. Основные понятия метода теории возмущений, теория Меллера-Плессе. Сравнительная характеристика методов учета корреляционной энергии. Теория функционала плотности, основные понятия. Метод Кона-Шэма. Различные виды корреляционных и обменных функционалов. Гибридные методы.	1	1		7	[7-11, 16]		Индивидуальный и групповой устный опрос; коллоквиум
12	Расчет свойств органических молекул. Полное конфигурационное взаимодействие. Совершенный базисный набор. Ограничения,	1	1		4,8	[7-11, 16]		Индивидуальный и групповой устный опрос;

	<p>вызванные усложнением метода расчета. Компромиссные подходы. Метод изодесмических реакций в сочетании со сложным методом квантовохимического расчета. Семейство методов CBS и их отдельные представители: CBS-APNO, CBS-Q3 и др. Семейство композитных методов Gaussian. Метод G1. Его недостатки и их учет в методе G2. Упрощение метода: процедуры G2MP2, G2M(RCC) и другие. Методы G3 и G4</p>							<p>коллоквиум</p>
	<p><b>Всего часов:</b></p>	<p>12</p>	<p>14</p>	<p>-</p>	<p>81,8</p>			

