

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Химический институт им.А.М.Бутлерова

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор

Проректор по научной деятельности КФУ

Проф. Д.К. Нургалеев

«_____» _____ 20__ г.



Программа дисциплины

Б1.В.ОД.5 - ЭВМ в химических расчетах

Направление подготовки: 04.06.01 – Химические науки

Профиль подготовки: 02.00.08 – Химия элементоорганических соединений
Квалификация выпускника: «Исследователь. Преподаватель-исследователь»
Форма обучения: очная
Язык обучения: русский

Казань 2015

1. КРАТКАЯ АННОТАЦИЯ

Данная дисциплина связана с предшествующими курсами физической химии, квантовой химии, строения вещества, информатики. Обучающийся должен знать основы химической термодинамики, квантовой химии и строения вещества. Обучающийся также должен иметь навыки практической работы с ЭВМ, желательно знание пакета Mathcad.

В ходе изучения данной дисциплины обучающиеся должны получить представление о моделировании равновесий в сложных многокомпонентных системах, о построении модели состояния комплексной частицы в растворе. Освоение данного курса необходимо для выполнения квалификационных работ в области неорганической химии и химии растворов.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ) В СТРУКТУРЕ ОПОП

Дисциплина «ЭВМ в химических расчётах» относится к обязательным дисциплинам раздела «Вариативная часть» (Б1.В.ОД) послевузовского профессионального образования.

Осваивается на 2 курсе (4 семестр).

Для успешного освоения данной дисциплины нужно освоение в качестве предшествующих следующих дисциплин: «Неорганическая химия» (ионные равновесия в растворе, химия комплексных соединений), «Аналитическая химия» (статистические методы анализа), «Физическая химия» (термодинамика и кинетика).

3. ПЕРЕЧЕНЬ ПЛАНИРУЕМЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

«ЭВМ в химических расчётах»

Обучающийся, завершивший изучение дисциплины, должен
знать: общие закономерности протекания химических реакций в растворах и твердой фазе, основы химической термодинамики и кинетики.

уметь: представлять для расчета равновесные данные физико-химических методов, создавать компьютерные молекулярные модели.

владеть: теоретическими знаниями о химическом эксперименте и возможностях статистических представлений при качественном и количественном описании сложных химических систем.

демонстрировать способность и готовность: применять результаты освоения дисциплины в профессиональной деятельности.

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
УК-1	способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях
УК-2	способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки
УК-3	готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач
УК-5	способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития
ОПК-1	способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-

	коммуникационных технологий
ПК-1	умение применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных
ПК-4	владение современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований
ПК-5	формирование опыта профессионального участия в научных дискуссиях, умением представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций
ПК-6	способность организовать и проводить исследования в рамках химических и смежных специальностей

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

4.1. Распределение трудоёмкости дисциплины (в часах) по видам нагрузки обучающегося и по разделам дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 часа.

Форма промежуточной аттестации по дисциплине: зачет в 4 семестре.

	Раздел дисциплины	Семестр	Лекции	Практические занятия	Самостоятельная работа
1.	Тема: Становление концепции, этапы развития решения прямых и обратных задач при количественно-качественном описании химических исследований	4	2	0	
2.	Тема: Независимые компоненты и матрицы стехиометрии в химических реакциях.	4	2	0	9
3.	Тема: Модельный объект и его неизвестные состояния.	4	2	0	9
4.	Тема: Прямые и обратные задачи химического равновесия.	4	2	2	9
5.	Тема: Количественные обратные задачи.	4	2	2	9
6.	Тема: Некоторые типовые оценочные процедуры. Метод максимального правдоподобия.	4	1	0	9
7.	Тема: Знакомство с математической программой Mathcad 2012.	4	1	2	9

Всего:		12	6	54
--------	--	----	---	----

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1.

Становление концепции, этапы развития решения прямых и обратных задач при количественно-качественном описании химических исследований.

Тема 2.

Независимые компоненты и матрицы стехиометрии в химических реакциях. Формы учета материального баланса и условий равновесия.

Тема 3.

Модельный объект и его неизвестные состояния. Экспериментальное поле наблюдений. Теоретическое поле измерений. Модели экспериментального материала. Законы распределения вероятностей расхождения экспериментального и теоретических полей.

Тема 4.

Прямые и обратные задачи химического равновесия. Математическая трактовка. Физическая трактовка.

Тема 5.

Количественные обратные задачи. Типовые модели экспериментального материала. Модели прямых измерений. Модели косвенных измерений с линейной зависимостью модельного поля от неизвестных параметров. Функции образования в двухбазисных и многобазисных системах по данным физико-химических измерений.

Тема 6.

Некоторые типовые оценочные процедуры. Оценивание с использованием готовых теоретических решений. Метод максимального правдоподобия. Функции достаточного приема. Замечания относительно оптимальных методов оценивания.

Тема 7.

Знакомство с математической программой Mathcad 2012.

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

На лекциях:

- интерактивные лекции.

На семинарах:

- ответы на вопросы и устные сообщения на заданную тему.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

Вопросы к практическим занятиям

Тема 1.

1. Метод последовательного сужения области поиска
2. Оценивание неизвестных параметров при известной матрице ковариации случайной компоненты
3. Оценивание путем минимизации меры расхождения экспериментального и теоретического полей

Тема 2

4. Метод максимального правдоподобия
5. Теоретическое модельное поле
6. Расхождение экспериментального и теоретического полей

Тема 3.

7. Экспериментальное поле измерений
8. Неоднозначность решения обратных задач
9. Математическая трактовка прямых и обратных задач

Тема 4.

10. Законы распределения вероятностей экспериментального и теоретического полей. Матрица ковариаций
11. Модели прямых измерений. Модель косвенных измерений с линейной зависимостью.
12. Модельный объект и его неизвестные состояния

Тема 5.

13. Общая модель измерений
14. Физическая трактовка обратных задач

Тема 6

15. Оценивание с использованием готовых теоретических полей.
16. Функции достаточного приема.

Тема 7.

17. Итерационная процедура Ньютона-Лекама
18. Градиентный перебор неизвестных параметров

Вопросы к самостоятельной работе

Тема 1.

Работы Силлена Л.Г. по математической трактовке образования полиядерных комплексов

Тема 2.

Сравнение описания равновесной системы с помощью последовательных и общих констант равновесий.

Тема 3.

Примеры построения модельных объектов на основе данных методов рН-метрии и протонной магнитной релаксации.

Тема 4.

Ознакомление с работой основных блоков программы CPESSP.

Тема 5

С помощью программы CPESSP провести расчет равновесного состава для модельной системы.

Тема 6.

С помощью программы CPESSP провести несколько вариантов решения обратной задачи для модельной системы, предполагая образование как моно-, так и полиядерных комплексов.

Тема 7.

Выбрать наиболее оптимальные варианты связности для модельной молекулы и выявить наиболее конформации.

7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

7.1. Регламент дисциплины

Лекции	14 часов
Отчетности (официальные)	Зачет
Количество баллов, выделенных на курс	100

Таблица 2 Распределение баллов по видам занятий

Тест-задания	5
Опрос на лекциях	5
Контрольная работа	25
Реферат	15
Зачет	50

7.2. Оценочные средства текущего контроля

Тестирование по темам 1-7.

Примеры тестовых заданий:

1. Функция образования - это:

А – среднее число лигандов, связанных с одним ионом металла

Б – среднее число молекул воды, связанных с ионом металла

В – среднее число ионов металла, связанных с лигандом

(ответ: А)

Условие минимума энергии Гиббса:

А $\Delta G = \min(\sum n_i(\mu_i^0 + RT \ln N_i))$

Б $\Delta G = \min(\sum n_i(S_i^0 + RT \ln N_i))$

В $\Delta G = \min(\sum n_i(\Delta H_i^0 - T\Delta S_i^0 + RT \ln N_i))$

(ответ: А)

3. Поле наблюдений – это:

А электромагнитное поле

Б электрическое поле

В совокупность экспериментальных данных.

(ответ: В)

4. Модельный объект – это:

А. Раствор, содержащий предполагаемые комплексные частицы

Б. Шаростержневая модель комплексной частицы.

В. Идеализированная совокупность полей наблюдений

(ответ: В)

5. Метод молекулярной механики использует математическую аппроксимацию поверхности:

А. Ньютона-Рафсона

Б. Борна-Оппенгеймера

В. Римана –Лобачевского

(ответ: Б)

6. Энергия деформации связей и валентных углов определяется потенциалом в форме закона:

А. Бэра

Б. Гука

В. Кирхгофа

(ответ: Б)

7. Взаимодействие валентно-несвязанных атомов описывается потенциалом:

А. Букингама

Б. Вектор-потенциалом магнитного поля

В. Леннард – Джонса.

Г. Гравитационным потенциалом

(ответ: А, В)

8. Распределение мольных долей конформеров определяется:

А. Разницей абсолютных энтропий

Б. Разницей энтальпий образования

В. Разницей свободных энергий

(ответ: В)

9. Наиболее выгодная геометрия комплекса ML_8 может быть представлена следующим полиэдром:

А. Двухшапочная тригональная призма.

Б. Куб

В. Додекаэдр

Г. Квадратная антипризма

(ответ: Г)

10. Наиболее выгодная геометрия комплекса ML_9 может быть представлена следующим полиэдром:

А. Трехшапочная тригональная призма.

Б. Одношапочный куб

В. Одношапочный додекаэдр

Г. Одношапочная квадратная антипризма

(ответ: А)

Темы рефератов

1. Методы поиска экстремума.
2. Количественное описание сложных равновесных систем
3. Метод Бринкли
4. Силовые поля молекулярной механики.

Письменное домашнее задание

1. По предложенной выборке данных с помощью программы CPESSP провести моделирование равновесий в системе железо(III) – лимонная кислота.
2. По предложенной выборке данных с помощью программы CPESSP провести моделирование равновесий в системе диспрозий(III) – лимонная кислота
3. По предложенной выборке данных с помощью программы CPESSP провести моделирование равновесий в системе диспрозий(III) - d-винная кислота.
4. По предложенной выборке данных с помощью программы CPESSP провести моделирование равновесий в системе железо(III) – молочная кислота
5. По предложенной выборке данных с помощью программы CPESSP провести моделирование равновесий в системе тербий(III) – d-винная кислота
6. С помощью программного пакета HYPERCHEM найти наиболее выгодные конформации монотартрата диспрозия
7. С помощью программного пакета CHEM DRAW найти наиболее выгодные конформации ксилотриоксиглутаровой кислоты.

7.3. Вопросы к зачету

Билет 1

1. Метод последовательного сужения области поиска.
2. Оценивание неизвестных параметров при известной матрице ковариации случайной компоненты.

Билет 2

1. Оценивание путем минимизации меры расхождения экспериментального и теоретического полей.
2. Метод максимального правдоподобия

Билет 3

1. Метод молекулярной механики
2. Моделирование гидратной сферы комплекса на примере монотартрата диспрозия

7.4. Таблица соответствия компетенций, критериев оценки их освоения и оценочных средств

Индекс компетенции	Расшифровка компетенции	Показатель формирования компетенции для данной дисциплины	Оценочное средство
--------------------	-------------------------	---	--------------------

УК-1	способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	Приобретение способности к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	Вопросы на лекциях, Тест-задания (темы 1-4)
УК-2	способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	Приобретение способности проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	Вопросы на лекциях, Тест-задания (темы 4-7)
УК-3	готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач	готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач	Вопросы на лекциях, Тест-задания (темы 4-7)
УК-5	способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития	способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития	Вопросы на лекциях, Тест-задания (темы 4-7)
ОПК-1	способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	Приобретение способности самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	Вопросы на лекциях, Контрольная работа Практические занятия

ПК-1	умение применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных	Аспирант демонстрирует умение работать с базами данных	Вопросы на лекциях, Контрольная работа Практические занятия
ПК-4	владение современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передачи информации при проведении самостоятельных научных исследований	Аспирант демонстрирует владение современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований	Вопросы на лекциях, Контрольная работа Практические занятия
ПК-5	формированием опыта профессионального участия в научных дискуссиях, умением представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций	Аспирант демонстрирует умение применения дистанционных технологий для ведения научных дискуссий	Вопросы на лекциях, Контрольная работа Практические занятия
ПК-6	способность организовать и проводить исследования в рамках химических и смежных специальностей	Аспирант демонстрирует умение применения компьютерных технологий в исследованиях	Вопросы на лекциях, Контрольная работа Практические занятия

8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПРИ ОСВОЕНИИ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Работу по дисциплине следует начать с предварительной проработки литературы. Предварительно надо изучить руководства по работе в программных пакетах CPESP, HYPERCHEM, CHEM DRAW. Также весьма желательно проработать материалы, касающиеся вопросов комплексообразования в растворах (литература дается лектором).

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

9.1. Основная литература

1. Учебно-методическое пособие по Информатике / Казан. федер. ун-т; [авт.-сост.: Б. М. Насыртдинов, В. Е. Косарев].-Казань: Казанский университет, 2011. -132 с.
2. Введение в хемоинформатику. Компьютерное представление химических структур: учебное пособие / Т. И. Маджидов [и др.] Казань: Казанский университет, 2013. 173 с.
3. Конспект лекций по спецкурсу "Структура конформационно-нежестких полиядерных комплексов" / В. В. Чевела, С. Г. Безрядин, В. Ю. Иванова -2011.— Казань : Печатный двор . - 28 с. : ил. ; 21.

4. Иллюстративный материал к спецкурсу "Структура конформационно-нежестких полиядерных комплексов" / В. В. Чевела, С. Г. Безрядин, В. Ю. Иванова. -Казань: Печатный двор, 2011. - 37 с. : ил. ; 21
5. Математическая обработка результатов химического эксперимента: учебно-методическое пособие для лекционного курса "Метрология" [Электронный ресурс] /Н.А. Улахович, М.П. Кутырева, Л.Г. Шайдарова, Ю.И. Сальников.- Казань: Казанский (Приволжский)Федеральный университет, 2010.- 60 с.
6. Маджидов Т.И. Хемоинформатика и молекулярное моделирование: дистанционный курс для студентов бакалавриата и магистратуры направления подготовки: 020100 "Химия" [Электронный ресурс]. Площадка "Зилант" СУО КФУ, 2013. // <http://zilant.kpfu.ru/course/view.php?id=376>
7. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. 2-е издание. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2012. - 496 с. Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=3150

9.2. Дополнительная литература

1. Сальников, Ю.И. Полиядерные комплексы в растворах. - Казань, 1989. - 288 с.
2. Бакстон Ш. Введение в стереохимию органических соединений: от метана до макромолекул / Ш. Бакстон, С. Робертс; пер. с англ. к.х.н. В. М. Демьянович. -Москва: Мир, 2005. -311 с.
3. Гольцман Ф.М. Физический эксперимент и статистические выводы. Изд-во ЛГУ, 1982. - 191 С.
4. Татаринов Д.А., Немтарев А.В. Онлайн поисковые системы научной информации. / учебно-методическое пособие. - Казань: Казанский (Приволжский) федеральный университет. -2013 г. -30 с.

http://kpfu.ru//staff_files/F487362088/Onlajn.poiskovye.sistemy.nauchnoj.informacii.pdf

9.3. Интернет-ресурсы:

<http://www.krelib.com/matematika/1466>
<http://icchair.niic.nsc.ru/lectures/2.shtml>
http://krelib.com/obshaja_fizika/33781
<http://arhivknig.com/obrazovanie/56490-fiziko-khimicheskie-raschety-na-mikro-jevm..html>
http://krelib.com/fizicheskaja_himija_himicheskaja_fizika/14364
http://elibrary.ru/title_about.asp?id=18537
http://elibrary.ru/title_about.asp?id=33274
<http://dasher.wustl.edu/tinker/>

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

1. Мультимедийный проектор и ноутбук.
2. Компьютерный класс.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации), утвержденного приказом МОиН РФ от 30 июля 2014 г. N 869.

Автор(ы): профессор
профессор

Сальников Ю.И.
Чевела В.В.

Рецензент: профессор

Девятов Ф.В.

Программа одобрена на заседании учебно-методической комиссии Химического института протокол № 7 от 31 августа 2015 г.