

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по научной деятельности КФУ
Проф. Д.К. Нургалиев



Программа дисциплины

Б1.В.ОД.5 ЭВМ в химических расчетах

Направление подготовки: 04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) подготовки: 02.00.04 Физическая химия

Квалификация выпускника: «Исследователь. Преподаватель-исследователь»

Форма обучения: очная

Язык обучения: русский

Казань
2014

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 (МОДУЛЮ)

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
ОПК-1	способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий
ПК-4	владение современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований

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 часов.

Форма промежуточной аттестации по дисциплине: зачет в 4 семестре.

	Раздел дисциплины	Семестр	Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	Самостоятельная работа
1.	Тема: Становление концепции, этапы развития решения прямых и обратных задач при количественно-качественном описании химических исследований	4	2	0	0	
2.	Тема: Независимые компоненты и матрицы стехиометрии в химических реакциях.	4	2	0	0	9
3.	Тема: Модельный объект и его неизвестные состояния.	4	2	0	0	9
4.	Тема: Прямые и обратные задачи химического равновесия.	4	2	2		9
5.	Тема: Количественные обратные задачи.	4	2	2	0	9
6.	Тема: Некоторые типовые оценочные процедуры. Метод максимального правдоподобия.	4	2	0	0	9
7.	Тема: Знакомство с математической программой Mathcad 2012.	4	2	2	0	9
	Всего:		12	6	0	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 CPRESSP.

Тема 5

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

Тема 6.

С помощью программы CPRESSP 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 оптимальные 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)

1. 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
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-4	владение современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче 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

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 CPRESSP, 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. Татаринев 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.poiskovyje.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 и с учетом рекомендаций по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки (Приказ Минобрнауки РФ от 30.07.2014 №869).

Авторы:
д.х.н., профессор





Сальников Ю.И.

д.х.н., профессор

Чевела В.В.

Рецензент:

д.х.н., профессор

Девятов Ф.В.

Программа одобрена на заседании Учебно-методической комиссии Химического института им. А.М Бутлерова КФУ от 29 августа 2014 года, протокол № 10.