


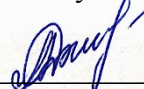
МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Астраханский государственный университет имени В. Н. Татищева»  
(Астраханский государственный университет им. В. Н. Татищева)

СОГЛАСОВАНО  
Руководитель ОПОП

  
\_\_\_\_\_ А.Г. Тырков  
«\_24\_» \_\_ января \_\_ 2025\_ г.

СОГЛАСОВАНО  
Заведующий кафедрой

  
\_\_\_\_\_ Л.А. Джигола  
«\_24\_» \_\_ января \_\_ 2025\_ г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**«ПРОБЛЕМЫ ЭКОЛОГИИ НА СТЫКЕ МАТЕМАТИКИ, ФИЗИКИ И ХИМИИ»**

Составитель	<b>Золотарева Н.В., к.т.н., доцент, доцент кафедры химии</b>
Направление подготовки / специальность	<b>04.03.01 ХИМИЯ</b>
Направленность (профиль) ОПОП	<b>ХИМИЯ</b>
Квалификация (степень)	<b>Бакалавр</b>
Форма обучения	<b>Очная</b>
Год приема	<b>2023</b>
Курс	<b>4</b>
Семестр	<b>8</b>

## 1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

**1.1. Цель дисциплины “Проблемы экологии на стыке математики, физики и химии”:** ознакомить студентов с современными проблемами экологии с позиции физики, математики и химии.

**1.2. Задачи освоения дисциплины “Проблемы экологии на стыке математики, физики и химии”:** ознакомление студентов с современными проблемами экологии с позиции физики, математики и химии. С появлением современных компьютерных программ теоретические исследования становятся всё более значимыми в области познания, изучения и решения эколого-биологических и эколого-химических задач.

## 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП

**2.1. Учебная дисциплина “Проблемы экологии на стыке математики, физики и химии” относится** к части, формируемой участниками образовательных отношений и осваивается в 8 семестре. Дисциплина встраивается в структуру ОПОП ВО как с точки зрения преемственности содержания, так и с точки зрения непрерывности процесса формирования компетенций выпускника.

**2.2. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы следующие знания, умения и навыки, формируемые предшествующими учебными дисциплинами:**

Студенты, изучающие дисциплину “Проблемы экологии на стыке математики, физики и химии”, должны иметь базовые знания по математике, физике и информатике в пределах цикла дисциплин.

- «Математика»

Знания: представления о функциях одной и нескольких переменных; статистическая обработка данных;

Умения: решение систем линейных и нелинейных уравнений; построение корреляционных зависимостей;

Навыки: осуществлять интегрирование и дифференцирование функций; решения дифференциальных уравнений; обработка экспериментальных данных.

- «Физика»

Знания: основные физические свойства света, волны; законы оптики; законов классической механики;

Умения: решать фундаментальные задачи;

Навыки: обработки данных, формирования выводов, постановка экспериментов.

- «Введение в информационные технологии»

Знания: представлениями об устройстве компьютера; о функционировании системного и прикладного программного обеспечения;

Умения: работать с прикладным программным обеспечением;

Навыки: работы с пользовательскими программными комплексами.

- «Квантовая экологическая химия»

Знания: представления о волновых функциях; вычислительных методах расчета энергии и структурных параметров молекул; статистическая обработка данных;

Умения: использовать стандартные методики расчета параметров молекул; построение корреляционных зависимостей;

Навыки: осуществлять анализ квантово-химических результатов; обработка экспериментальных данных.

**2.3. Последующие учебные дисциплины (модули) и (или) практики, для которых необходимы знания, умения, навыки, формируемые данной учебной дисциплиной:**  
- преддипломная практика.

### 3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП ВО по данному направлению подготовки:  
*а) универсальные (УК): УК-1 – Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач.*

**Таблица 1 – Декомпозиция результатов обучения**

Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)		
	Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)
<i>УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач</i>	ИУК-1.1.1 ключевые программные пакеты, онлайн ресурсы для составления многопоточных задач, этапы выполнения работы	ИУК-1.2.1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана работы	ИУК-1.3.1 приемами, техникой сбора, систематизации и обработки данных, а также их графической визуализации и интерпретации
	ИУК-1.1.2 систематизирует отдельные стадии исследования, подготавливает результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений	ИУК-1.2.2 анализирует результаты экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	ИУК-1.3.2 выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач
	ИУК-1.1.3 приемы обработки результатов испытаний с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	ИУК-1.2.3 строить графические зависимости и модельные схемы для интерпретации полученных результатов. Применение прогностических схем при моделировании.	ИУК-1.3.3 Проводит отбор, идентификацию образцов, подготовку технической документации на образцы, устанавливает нормативные значения контролируемых показателей

#### 4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Объем дисциплины составляет **3 зачетные единицы**, в том числе 45 часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (из них по видам учебных занятий в соответствии с учебным планом 15 часов – лекции, 30 часов – лабораторные работы), и 63 часа – на самостоятельную работу обучающихся.

**Таблица 2** – Структура и содержание дисциплины

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Семестр	Контактная работа (в часах)			Самостоятельная работа (в часах)		Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
		Л	ПЗ	ЛР	КР	СР	
Раздел 1. Предмет изучения экологических проблем на стыке наук							
Тема 1. Актуальные направления современной экологии, проблемы междисциплинарного подхода в решении экологических задач.	8	2		2		6	Отчет по заданиям для самоконтроля в <a href="http://moodle.asu-edu.ru">moodle.asu-edu.ru</a> Подготовка презентаций
Раздел 2. Взаимодействие физики и экологии							
Тема 2. Роль физики в оценке влияния деятельности человека на окружающую среду и решении экологических проблем.	8	2		4		9	Отчет по лабораторно-вычислительной работе №2 Дискуссия
Раздел 3. Взаимодействие математики и экологии							
Тема 3. Роль статистических методов на разных этапах анализа.	8	2		4		12	Отчет по лабораторно-вычислительной работе №3 Дискуссия
Раздел 4. Взаимодействие химии и экологии. Метаболические превращения в объектах окружающей среды							
Тема 4.1. Основные понятия экологической химии и современные проблемы.	8	2		4		12	Отчет по лабораторно-вычислительной работе №4 Дискуссия
Тема 4.2 Основы действия токсикантов на биологические структуры.	8	4		8		12	Отчет по лабораторно-вычислительной работе №5 Дискуссия
Раздел 5. Междисциплинарный подход в экологии. Альтернативные способы моделирования экологического состояния систем.							
Тема 5.1 Общее понятие модели, классификация моделей по способам реализации: абстрактные (вербальные, знаковые, математические), материальные. Примеры из экологии, химии и биохимии.	8	3		8		12	Отчет по заданиям для самоконтроля в <a href="http://moodle.asu-edu.ru">moodle.asu-edu.ru</a> Подготовка презентаций
<b>ИТОГО</b>		<b>15</b>		<b>30</b>		<b>63</b>	<b>ЭКЗАМЕН</b>

*Примечание:* Л – лекция; ПЗ – практическое занятие, семинар; ЛР – лабораторная работа; КР – курсовая работа; СР – самостоятельная работа.

**Таблица 3 – Матрица соотнесения разделов, тем учебной дисциплины и формируемых компетенций**

Темы, разделы дисциплины	Кол-во часов	Код компетенции	Общее количество компетенций
		УК-1	
<b>Раздел 1. Предмет изучения экологических проблем на стыке наук</b>			
Тема 1. Актуальные направления современной экологии, проблемы: междисциплинарных подход в решении экологических задач.	10	+	1
<b>Раздел 2. Взаимодействие физики и экологии</b>			
Тема 2. Роль физики в оценке влияния деятельности человека на окружающую среду и решении экологических проблем.	15	+	1
<b>Раздел 3. Взаимодействие математики и экологии</b>			
Тема 3. Роль статистических методов на разных этапах анализа.	18	+	1
<b>Раздел 4. Взаимодействие химии и экологии. Метаболические превращения в объектах окружающей среды</b>			
Тема 4.1. Основные понятия экологической химии и современные проблемы.	18	+	1
Тема 4.2 Основы действия токсикантов на биологические структуры.	24	+	1
<b>Раздел 5. Междисциплинарный подход в экологии. Альтернативные способы моделирования экологического состояния систем.</b>			
Тема 5.1 Общее понятие модели, классификация моделей по способам реализации: абстрактные (вербальные, знаковые, математические), материальные. Примеры из экологии, химии и биохимии.	23	+	1
<b>Итого</b>	<b>108</b>		

### **Краткое содержание каждой темы дисциплины**

**Раздел 1. Предмет изучения экологических проблем на стыке наук.** Актуальные направления современной экологии, проблемы: междисциплинарных подход в решении экологических задач. Экология как наука: роль и место в современном естествознании. Предмет и задачи экологии. Структура современной экологии. Объекты и методы исследования современной экологии. Уровни организации живой материи, изучаемые в экологии. Современная концепция экологии. Основные понятия и термины.

**Раздел 2. Взаимодействие физики и экологии.** Роль физики в оценке влияния деятельности человека на окружающую среду и решении экологических проблем. Загрязнение атмосферы, её состав и физические параметры. Искусственные источники загрязнения: загрязнение атмосферы при авиаполётах, запусках космических аппаратов, наличие космического мусора. Физические методы и модели уменьшения и очистки газопылевых выбросов. Загрязнение воды. Распространение загрязняющих веществ в воде. Понятие о предельной допустимой концентрации. Влияние нефтяной плёнки на жизнь в водоёме. Физические основы работы очистных сооружений. Традиционные источники энергии. Органическое топливо и загрязнение окружающей среды при его сжигании. Проблема истощаемости ресурсов углеродистых энергоносителей. Экологические проблемы строительства и эксплуатации ГЭС. Экологическая характеристика и перспективность ядерной энергетики. Опасность аварий на ядерных реакторах и меры их предотвращения. Энергетика на основе возобновляемых источников энергии. Нетрадиционная энергетика и альтернативные

источники энергии. Ветроэлектростанции. Приливно-отливная энергетика. Гелиоэнергетика, её потенциал и экологические проблемы. Геотермальная энергетика. Возобновляемые источники энергии в энергетике настоящего и будущего. Современные грантовые исследования в области разработок аппаратуры, методов регистрации, локализации загрязнений и уменьшения рисков возникновения чрезвычайных ситуаций.

### **Раздел 3. Взаимодействие математики и экологии. Роль статистических методов на разных этапах анализа.**

Роль статистических методов на разных этапах анализа. Источники и вид представления экспериментальных данных. Промахи. Q-критерий. Примеры расчетных схем в спектрофотометрическом, титриметрическом, гравиметрическом, потенциометрическом и других методах исследования. Характеристика систематических ошибок. Случайные ошибки методов анализа. Статистическая обработка результатов измерений. Генеральная совокупность и выборка. Кривая распределения результатов. Функция распределения, математическое ожидание, дисперсия и другие параметры. Средние значения. Мера рассеяния. Эмпирическая функция распределения. Оценки параметров распределения и их свойства. Метод наименьших квадратов: реализация в программных приложениях (Microsoft Office, OpenOffice.org Calc, SciDAVis). Оценка параметров. Таблично заданные функции и их интерполяция. Точность и сходимость интерполяции. Примеры выполнения обработки экспериментальных или теоретических данных.

### **Раздел 4. Взаимодействие химии и экологии. Метаболические превращения в объектах окружающей среды.**

#### **Тема 4.1. Основные понятия экологической химии и современные проблемы.**

Современное состояние, роль химии в оценке влияния деятельности человека на окружающую среду и решении экологических проблем. Химический экологический фактор и химическое загрязнение. Закон толерантности. Жизненно необходимые химические элементы. Химическое загрязнение. Химический состав живых организмов. Неорганические, органические и металлоорганические вещества. Углеводороды, галогенпроизводные углеводородов, альдегиды, диоксины, нитросоединения. Экологическая химия атмосферы. Основные компоненты глобального экологического кризиса. Пыль и аэрозоли. Основные типы химических процессов в атмосфере. Фотохимические реакции. Свободные радикалы. Образование их в атмосфере. Парниковый эффект. Парниковые газы. Кислотные дожди. Влияние кислотных дождей на различные объекты. Смог, его типы и особенности образования. Экологохимические проблемы атмосферы и ее защита. Экологическая химия гидросферы. Аномальные физико-химические свойства воды. Классификация химического состава природных вод. Поверхностные природные воды. Свойства природных вод и их качество. Особенности химических процессов в гидросфере. Типы химических и физико-химических процессов в гидросфере. Процессы самоочищения водоемов. Цикл пероксида водорода, его экологическая роль в гидросфере. Буферная емкость пресноводных водоемов. Донные отложения, их экологическая роль в водоеме. Поведение соединений азота и фосфора в поверхностных водоемах. Загрязнение водоемов веществами органического характера. Эвтрофирование водоемов. Загрязнение водоемов и их охрана. Очистка загрязненных вод. Экологическая химия литосферы. Состав литосферы. Строение и химический состав земной коры. Химические процессы в литосфере. Состав почвы и процессы, происходящие в ней. Почвенные процессы с участием микроорганизмов. Физико-химические процессы. Адсорбция. Катионный обмен. Почвенно-поглощающий комплекс. Кислотность почвы. Виды почвенной кислотности. Антропогенное воздействие на почвы. Эрозия и засоление почв. Поллютанты почвы и их поведение. Удобрения, пестициды. Поведение пестицидов в почвах. Поведение тяжелых металлов и их соединений в почвах. Эколого-химические проблемы почвенного покрова. Экологическая химия биосферы. Понятие биосферы. Экологическая роль биосферы. Особенности биосферы. Границы биосферы. Вещество биосферы, типы вещества. Химический состав биосферы.

Биологическая миграция химических элементов. Биогеохимические циклы азота, фосфора, углерода, металлов. Функции живого вещества в биосфере. Химические процессы в биосфере. Особенности химических процессов в биосфере. Действие химических факторов на организмы. Хемомедиаторы (химические экорегуляторы). Поллютанты, их клеточные мишени. Виды токсического действия поллютантов. Защита биосферы.

**Тема 4.2. Основы действия токсикантов на биологические структуры.** Природа токсического действия. Биогеохимический цикл миграции химических элементов. Миграция антропогенных загрязнений. Внешние и внутренние факторы миграции. Схема миграции загрязнений. Поступление загрязняющих веществ в организм человека. Транспорт веществ в организме человека. Обмен веществ в организме человека. Биохимическая роль и токсические свойства химических элементов и их соединений. Общая характеристика химических элементов и их неорганических соединений. *s*-, *p*-, *d*-, *f*-элементы: общая характеристика, биохимическое значение, поступление и распределение в организме человека, токсическое действие и характеристики экологической опасности для живых организмов. Органические соединения: общая характеристика, токсические свойства, зависимость токсических свойств органических соединений от химического состава и строения. Клеточные мембраны. Транспорт веществ. Модель элементарной мембраны. Жидкостно-мозаичная модель. Энергетика пассивного и активного транспорта. Перенос веществ через биологические мембраны с помощью переносчиков. Основные структурные особенности ионофоров. Катионная селективность ионофоров. Динамика комплексообразования с ионофорами. Антибиотики-каналобразователи. Основы действия токсикантов на биологические структуры.

**Раздел 5. Междисциплинарный подход в экологии. Альтернативные способы моделирования экологического состояния систем.**

Общее понятие модели, классификация моделей по способам реализации: абстрактные (вербальные, знаковые, математические), материальные. Примеры из экологии, химии и биохимии. Классификация математических моделей по методам построения (аналитические, экспериментально-аналитические, экспериментально-регрессионные); целям использования (базовые и имитационные); формам математического представления (в обыкновенных и частных производных, интегро-дифференциальные, разностные, вероятностные и т.д.). Визуальное сопровождение результатов моделирования. Имитационные модели как инструмент исследования реальных экологических систем. Иерархия моделей в экологии. Общий вид базовой модели экологической системы. Итерационная процедура построения имитационных моделей. Разработка концептуальной модели на основе предварительных литературных и экспериментальных данных (выбор переменных и параметров, формулировка основных предпосылок и гипотез о структурных связях и взаимодействиях с окружающей средой и др.). Структурная идентификация математической модели. Проверка качества аппроксимации экспериментальных данных, использованных для поиска коэффициентов модели. Проверка адекватности модели по независимым экспериментам. Анализ чувствительности модели по параметрам. Использование разработанной модели как инструмента для исследования экосистем. Системный подход и системный анализ. Роль и место математического моделирования в организации системных исследований.

## **5. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ПРЕПОДАВАНИЮ И ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ**

### **5.1. Указания для преподавателей по организации и проведению учебных занятий по дисциплине**

При подготовке к лабораторным работам студентам отводится время на самостоятельную работу, которая включает изучение материалов лекционного курса, ознакомление с материалами, изложенными в учебниках и иных источниках информации,

включая поисковую работу в интернете, выполнение домашних (задач для самоконтроля) и подготовку презентаций к отчету по лабораторной работе.

Предусмотрено самостоятельное выполнение заданий по отдельным темам дисциплины, оценивание результатов выполненных заданий осуществляется по тематическим контрольным работам. Лекция в классическом представлении является главным звеном дидактического цикла обучения, однако такие лекции дополнены презентациями, видеороликами, визуализацией прикладных программ.

Лекционный материал выстроен следующим образом:

- изложение материала ведется от простого к сложному, от известного к неизвестному с включением интерактивных методов;
- выстраивается логичность, четкость и ясность изложения материала с примерами выполнения заданий;
- смысловая часть должна содержать факты, закономерности и статистические данные;
- с целью активизации деятельности студентов часть лекционного материала включает проблемные темы с дискуссией (диалогом);
- прослеживается тесная связь теоретических положений, формулировок и выводов с практикой и реализацией будущей профессиональной деятельностью студентов.

Лабораторные занятия способствуют закреплению знаний полученных студентами в ходе обучения и самостоятельной работы, формированию компетенций, навыков в получении информации, приобретению умений провести ее обработку и анализ, овладению навыками планирования, анализа и управления. Общее требование при разработке тематики лабораторных таково - этот вид аудиторных занятий должен научить студента правильно оценить и предвидеть развитие ситуации, управлять ее формированием, владению методами анализа. На занятиях проводится отработка практических умений под контролем преподавателя. С целью активизации деятельности студентов в рамках выполнения отчетов по выполненным лабораторным работам включаются проблемные темы с дискуссией (диалогом). В конце каждого лабораторного занятия преподаватель планирует 6-7 минут для подведения итогов. Он обращает внимание на то, как освоен учебный материал по теме в целом, анализирует типичные ошибки и недоработки студентов, акцентирует их внимание на значимость темы.

## **5.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины**

При подготовке к лабораторно-вычислительным работам студентам отводится время на самостоятельную работу, которая включает изучение материалов лекционного курса, ознакомление с материалами, изложенными в учебниках и иных источниках информации, включая поисковую работу в интернете, выполнение домашних (задач для самоконтроля) и тестовых заданий. Полезно использовать образовательный портал электронного образования Астраханского государственного университета им. В.Н. Татищева (<http://moodle.asu-edu.ru/>) на котором постоянно обновляется информация о текущих заданиях и присутствует необходимый материал по курсу учебной дисциплины.

Лабораторная (лабораторно-вычислительная) работа выполняется в минигруппах за персональными компьютерами и предусматривает прорешивание заданий по отдельным темам разделов: «Методы математической статистики. Статистическая обработка экспериментальных данных для решения задач аналитической химии», «Реализация численных методов в прикладных программных комплексах». Состав минигруппы 2-4 человека. Контроль за освоением разделов и тем дисциплины осуществляется по рейтинговой системе БАРС. В случае возникновения вопросов могут быть адресованы преподавателю на индивидуальной (групповой) консультации или по электронной почте [zoloto.chem@mail.ru](mailto:zoloto.chem@mail.ru) при согласовании с преподавателем.

Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине:

- Исидоров В.А. Экологическая химия: учеб. пособ. для вузов ... спец. "Охрана окружающей среды и рациональное использование природных ресурсов". - СПб.: Химиздат, 2001. - 304 с.;
- Ложниченко О.В. Экологическая химия: учебное пособие для вузов / О.В. Ложниченко, И.В. Волкова, В.Ф. Зайцев – М.: Академия, 2008. 272 с.;
- Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. 7-е изд. – М.: БИНОМ, 2012. 635 с.;
- Харитонов Ю.Я. Аналитическая химия: Аналитика: В 2-х кн. Кн. 2: учеб. для вузов. Количественный анализ. Физико-химические (инструментальные) методы анализа. - М.: Высш. шк., 2001. - 559 с.;
- Математические методы решения химических задач: доп. УМО по клас. унив. образованию в качестве учеб. пособия для студентов вузов...по направ. подготовки "Химия" / А.И. Козко и др. - М.: Академия, 2013. - 368 с.;
- Наац В.И. Математические модели и численные методы в задачах экологического мониторинга атмосферы [Электронный ресурс] / Наац В.И., Наац И.Э. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785922111607.html>;
- Кокотушкин Г.А. Численные методы алгебры и приближения функций: метод. указания к выполнению лабораторных работ по курсу "Численные методы" [Электронный ресурс] / Г.А. Кокотушкин, А.А. Федотов, П.В. Храпов. - М.: Издательство МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2011. - 58 с. Режим доступа: [http://www.studentlibrary.ru/book/bauman\\_0006.html](http://www.studentlibrary.ru/book/bauman_0006.html)
- Федоров А.А. Методы химического анализа объектов природной среды [Электронный ресурс] / А.А. Федоров, Г.З. Казиев, Г.Д. Казакова. - М.: КолосС, 2013. - 118 с. (Учебники и учеб. пособия для студентов высш. учеб. заведений). Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785953202886.html>
- Колок А. Современные яды: Дозы, действие, последствия [Электронный ресурс] / Колок А. - М.: Альпина Паблишер, 2017. - 215с. Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785961458688.html>
- Плетенёва Т.В. Токсикологическая химия [Электронный ресурс] / "Плетенева Т.В., Сыроешкин А.В., Максимова Т.В.; Под ред. Т.В. Плетенёвой" – М.: ГЭОТАР-Медиа, 2013. -512с. Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970426357.html>

**Таблица 4 – Содержание самостоятельной работы обучающихся**

Вопросы, выносимые на самостоятельное изучение	Кол-во часов	Форма работы
<b>Раздел 1. Теоретические основы математического моделирования химических процессов</b>		
<p><b>Тема 1. Актуальные направления современной экологии, проблемы: междисциплинарных подход в решении экологических задач.</b></p> <p>Структура современной экологии. Объекты и методы исследования современной экологии. Уровни организации живой материи, изучаемые в экологии. Современная концепция экологии. Основные понятия и термины.</p>	6	<p>Оформление отчета по заданиям для самоконтроля в <a href="http://moodle.asu-edu.ru">moodle.asu-edu.ru</a></p> <p>Подготовка презентаций</p>
<b>Раздел 2. Взаимодействие физики и экологии</b>		
<p><b>Тема 2. Роль физики в оценке влияния деятельности человека на окружающую среду и решении экологических проблем.</b></p> <p>Загрязнение атмосферы: наличие космического мусора, современные подходы к регистрации источников загрязнения и ликвидации последствий. Физические методы и модели уменьшения и очистки газопылевых выбросов.</p> <p>Загрязнение воды: Распространение загрязняющих веществ в воде. Понятие о предельной допустимой концентрации. Влияние нефтяной плёнки на жизнь в водоёме. Физические основы работы очистных</p>	9	<p>Оформление отчета по лабораторно-вычислительной работе №2</p> <p>Подготовка к вопросам дискуссии</p>

<p>сооружений.</p> <p>Органическое топливо и загрязнение окружающей среды при его сжигании. Проблема истощаемости ресурсов углеродистых энергоносителей. Экологические проблемы строительства и эксплуатации ГЭС. Экологическая характеристика и перспективность ядерной энергетики. Опасность аварий на ядерных реакторах и меры их предотвращения. Энергетика на основе возобновляемых источников энергии. Нетрадиционная энергетика и альтернативные источники энергии. Ветроэлектростанции. Приливно-отливная энергетика. Гелиоэнергетика, её потенциал и экологические проблемы. Геотермальная энергетика. Возобновляемые источники энергии в энергетике настоящего и будущего.</p> <p>Современные грантовые исследования в области разработок аппаратуры, методов регистрации, локализации загрязнений и уменьшения рисков возникновения чрезвычайных ситуаций.</p>		
<b>Раздел 3. Взаимодействие математики и экологии</b>		
<p><b>Тема 3. Роль статистических методов на разных этапах анализа.</b></p> <p>Статистическая обработка результатов измерений. Генеральная совокупность и выборка. Кривая распределения результатов. Функция распределения, математическое ожидание, дисперсия и другие параметры. Средние значения. Мера рассеяния. Эмпирическая функция распределения. Оценки параметров распределения и их свойства. Метод наименьших квадратов: реализация в программных приложениях (Microsoft Office, OpenOffice.org Calc, SciDAVis). Оценка параметров. Таблично заданные функции и их интерполяция. Точность и сходимость интерполяции. Примеры выполнения обработки экспериментальных или теоретических данных.</p>	12	<p>Оформление отчета по лабораторно-вычислительной работе №3</p> <p>Подготовка к вопросам дискуссии</p>
<b>Раздел 4. Взаимодействие химии и экологии.</b>		
<b>Метаболические превращения в объектах окружающей среды</b>		
<p><b>Тема 4.1. Основные понятия экологической химии и современные проблемы.</b></p> <p>Экологическая химия гидросферы. Аномальные физико-химические свойства воды. Типы химических и физико-химических процессов в гидросфере. Загрязнение водоемов и их охрана. Очистка загрязненных вод.</p> <p>Экологическая химия литосферы. Состав литосферы. Строение и химический состав земной коры. Химические процессы в литосфере. Физико-химические процессы. Адсорбция. Катионный обмен. Эколого-химические проблемы почвенного покрова.</p> <p>Экологическая химия биосферы. Понятие биосферы. Биологическая миграция химических элементов. Биогеохимические циклы азота, фосфора, углерода, металлов. Функции живого вещества в биосфере. Действие химических факторов на организмы. Поллютанты, их клеточные мишени. Виды токсического действия поллютантов. Защита биосферы.</p>	12	<p>Оформление отчета по лабораторно-вычислительной работе №4</p> <p>Подготовка к вопросам дискуссии</p>
<p><b>Тема 4.2 Основы действия токсикантов на биологические структуры.</b></p> <p>Общая характеристика химических элементов и их неорганических соединений. <i>s</i>-, <i>p</i>-, <i>d</i>-, <i>f</i>-элементы: общая характеристика, биохимическое значение, поступление и распределение в организме человека, токсическое действие и характеристики экологической опасности для живых организмов. Органические соединения: общая характеристика, токсические свойства, зависимость токсических свойств органических соединений от химического состава и</p>	12	<p>Оформление отчета по лабораторно-вычислительной работе №5</p> <p>Подготовка к вопросам дискуссии</p>

<p>строения. Клеточные мембраны. Транспорт веществ. Модель элементарной мембраны. Жидкостно-мозаичная модель. Энергетика пассивного и активного транспорта. Перенос веществ через биологические мембраны с помощью переносчиков. Основные структурные особенности ионофоров. Катионная селективность ионофоров. Динамика комплексообразования с ионофорами. Антибиотики-каналообразователи. Основы действия токсикантов на биологические структуры.</p>		
<p><b>Раздел 5. Междисциплинарный подход в экологии.</b>  <b>Альтернативные способы моделирования экологического состояния систем.</b></p>		
<p><b>Тема 5.1</b> <b>Общее понятие модели, классификация моделей по способам реализации: абстрактные (вербальные, знаковые, математические), материальные. Примеры из экологии, химии и биохимии.</b></p> <p>Разработка концептуальной модели на основе предварительных литературных и экспериментальных данных (выбор переменных и параметров, формулировка основных предпосылок и гипотез о структурных связях и взаимодействиях с окружающей средой и др.). Структурная идентификация математической модели. Проверка качества аппроксимации экспериментальных данных, использованных для поиска коэффициентов модели. Проверка адекватности модели по независимым экспериментам. Анализ чувствительности модели по параметрам. Использование разработанной модели как инструмента для исследования экосистем. Системный подход и системный анализ. Роль и место математического моделирования в организации системных исследований.</p>	12	<p>Оформление отчета по заданиям для самоконтроля в <a href="http://moodle.asu-edu.ru">moodle.asu-edu.ru</a>          Подготовка презентаций</p>

### **5.3. Виды и формы письменных работ, предусмотренных при освоении дисциплины, выполняемые обучающимися самостоятельно:**

Необходимым условием успешного усвоения дисциплины является систематический текущий контроль знаний студентов в течение всего семестра, который осуществляется в форме подготовки презентаций по ключевым тематическим вопросам в рамках выполнения лабораторно-вычислительной работы, а также выполнения тематических задач вычислительного практикума и подготовки отчета. Лабораторно-вычислительный практикум включает выполнение пяти лабораторно-вычислительных работ.

#### ***Пример оформления презентации***

Основное требование - соблюдение аккуратности в оформлении презентации (см. пример).



МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
Федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Астраханский государственный университет имени В. Н. Татищева»

## Название темы

**Выполнил(а):** Фамилия И.О., студент  
I курса химического факультета  
*E-mail:* .....@gmail.com

## Актуальность

Введение. Актуальные направления в рассматриваемой теме (проблеме).....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

## Цель и задачи

**Цель:** .....

**Задачи:**

1. ....;

2. ....;

3. ....

3

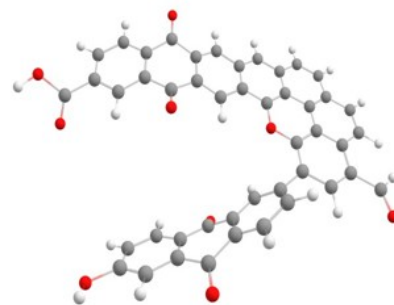
## Название подзаголовка

Раскрывается суть темы

.....

.....

.....



Приводятся по необходимости:

таблицы, графики, картинки, гиперссылки.

.....

.....

.....

.....

4

## Название подзаголовка

Добавляете столько слайдов, чтобы презентация раскрывала суть темы. Обязательно используем нумерацию слайдов!

### *Старайтесь не допускать!!!*

мелкий шрифт и большие объемы информации на слайде, белый шрифт на темном фоне, «кричащий, яркий» фон.

.....

.....

.....

### *Допустимо:*

использование переходов по слайдам, гиперссылок, автоматическое перелистывание слайдов.

5

## Название подзаголовка

**Таблица 1.** Если есть таблица, то к ней обязательно прописываем название

Название 1	Название 2	Название 3

1. Под таблицей тезисно дается характеристика;
2. ....
3. Перед таблицей обычно прописывают формулы.

6

## Выводы

Сформулировать тезисно выводы по выбранной теме:

- ...
- ...
- ...

В результате, ....

7

Формат: \*.ppt, классический макет. Шрифт: 16, Times New Roman. Не допускаются отсканированные встроенные графики и рисунки низкого разрешения. Подготовленная презентация должна полностью раскрывать материал. В презентацию должны быть включены следующие положения:

- актуальность направления;
- базовая терминология;
- обзор информации, публикаций по изучаемой теме, проблеме (для проблемных задач);
- ключевые критерии, положения, модельные задачи;
- выводы и прогнозы.

Добавление итогового слайда со словами «Спасибо за внимание!» допустимо, однако, не обязательно.

### 6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

При реализации различных видов учебной работы по дисциплине возможно применение в том числе электронного обучения и дистанционных образовательных технологий. В соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки / специальности реализация компетентного подхода предусматривает использование в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий (мини-опросы, компьютерное моделирование при реализации вычислительного практикума, разбор конкретных модельных ситуаций во внеурочной работе) с целью формирования и развития требуемых компетенций обучающихся.

В рамках учебного курса предусмотрены открытые видеоконференции, лекции и мастер-классы с представителями других ВУЗов с целью получения новых умений в рамках изучаемой дисциплины.

#### 6.1. Образовательные технологии

С целью формирования и развития профессиональных навыков у обучающихся в учебном процессе предусмотрены следующие активные и интерактивные формы проведения

практики: работа с применением компьютерных технологий (лабораторно-вычислительная работа на ПК); учебные дискуссии с подготовкой презентаций на заданную тему.

**Таблица 5 – Образовательные технологии, используемые при реализации учебных занятий**

Раздел, тема дисциплины	Форма учебного занятия		
	Лекция	Практическое занятие, семинар	Лабораторная работа
Раздел 1. Предмет изучения экологических проблем на стыке наук			
Тема 1. Актуальные направления современной экологии, проблемы: междисциплинарных подход в решении экологических задач.	Обзорная лекция	Не предусмотрено	лабораторно-вычислительная работа
Раздел 2. Взаимодействие физики и экологии			
Тема 2. Роль физики в оценке влияния деятельности человека на окружающую среду и решении экологических проблем.	Совмещенная лекция с применением ИТ	Не предусмотрено	лабораторно-вычислительная работа
Раздел 3. Взаимодействие математики и экологии			
Тема 3. Роль статистических методов на разных этапах анализа.	Обзорная лекция	Не предусмотрено	лабораторно-вычислительная работа
Раздел 4. Взаимодействие химии и экологии. Метаболические превращения в объектах окружающей среды			
Тема 4.1. Основные понятия экологической химии и современные проблемы.	Лекция	Не предусмотрено	лабораторно-вычислительная работа
Тема 4.2 Основы действия токсикантов на биологические структуры.	Совмещенная лекция с применением ИТ	Не предусмотрено	лабораторно-вычислительная работа
Раздел 5. Междисциплинарный подход в экологии. Альтернативные способы моделирования экологического состояния систем.			
Тема 5.1 Общее понятие модели, классификация моделей по способам реализации: абстрактные (вербальные, знаковые, математические), материальные. Примеры из экологии, химии и биохимии.	Лекция		лабораторно-вычислительная работа

Учебные занятия по дисциплине могут также проводиться с применением информационно-телекоммуникационных сетей при опосредованном (на расстоянии) интерактивном взаимодействии обучающихся и преподавателя в режимах on-line и/или off-line в формах: видеолекций, видеоконференции (с использованием платформы Zoom), собеседования в режиме чат, форума, чата, выполнения виртуальных практических работ и др.

## 6.2. Информационные технологии

Для организации самостоятельной работы студентов по курсу используются современные информационные технологии – комплекс учебных и учебно-методических материалов, в частности, программы, методические указания к практическим занятиям, информационные ресурсы в виде программных приложений:

- использование возможностей Интернета в учебном процессе (использование информационного сайта преподавателя (рассылка заданий, предоставление выполненных работ, ответы на вопросы, ознакомление учащихся с оценками и т.д.));
- использование электронных учебников и различных сайтов (например, электронные библиотеки, журналы и т.д.) как источников информации;
- использование возможностей электронной почты преподавателя ([zoloto.chem@mail.ru](mailto:zoloto.chem@mail.ru) или [nv.zolotareva@asu-edu.ru](mailto:nv.zolotareva@asu-edu.ru));
- использование средств представления учебной информации (электронных учебных пособий и практикумов, применение новых технологий для проведения очных (традиционных) лекций и семинаров с использованием презентаций и т.д.);
- использование интегрированных образовательных сред, где главной составляющей являются не только применяемые технологии, но и содержательная часть, т.е. информационные ресурсы (доступ к мировым информационным ресурсам, на базе которых строится учебный процесс);
- использование виртуальной обучающей среды (LMS Moodle «Электронное образование») или иных информационных систем, сервисов и мессенджеров.

Студенты получают задание для самостоятельного выполнения на каждом семинарском занятии на свой почтовый ящик и должны в течение недели перенаправить по электронной почте преподавателю ответ. При возможности, преподаватель может через e-mail указать на допущенные ошибки и дать возможность студенту переслать исправленное задание. Таким образом, осуществляется еженедельный контроль за освоением студентами материала дисциплины.

### **6.3. Программное обеспечение, современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы**

#### **6.3.1. Программное обеспечение**

1. Microsoft Office 2013, Microsoft Office Project 2013, Microsoft Office Visio 2013 (Офисная программа);
2. Microsoft Windows 7 Professional (Операционная система);
3. Adobe Reader (Программа для просмотра электронных документов);
4. MathCad 14 (Система компьютерной алгебры из класса систем автоматизированного проектирования, ориентированная на подготовку интерактивных документов с вычислениями и визуальным сопровождением, отличается лёгкостью использования).

#### **6.3.2. Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы**

1. Универсальная справочно-информационная полнотекстовая база данных периодических изданий ООО «ИВИС» <http://dlib.eastview.com>  
Имя пользователя: AstrGU  
Пароль: AstrGU
2. Электронный каталог Научной библиотеки АГУ на базе MARK SQL НПО «Информ-систем» <https://library.asu-edu.ru/catalog/>
3. Электронный каталог «Научные журналы АГУ» <https://journal.asu-edu.ru/>
4. Корпоративный проект Ассоциации региональных библиотечных консорциумов (АРБИКОН) «Межрегиональная аналитическая роспись статей» (МАРС) – сводная база данных, содержащая полную аналитическую роспись 1800 названий журналов по разным отраслям знаний. Участники проекта предоставляют друг другу электронные копии отсканированных статей из книг, сборников, журналов, содержащихся в фондах их библиотек <http://mars.arbicon.ru>
5. Электронная библиотечная система IPRbooks [www.iprbookshop.ru](http://www.iprbookshop.ru)
6. Электронно-библиотечная система BOOK.ru <https://book.ru>

7. Электронная библиотечная система издательства ЮРАЙТ, раздел «Легендарные книги» [www.biblio-online.ru](http://www.biblio-online.ru), <https://urait.ru/>
8. Электронная библиотека «Астраханский государственный университет» собственной генерации на платформе ЭБС «Электронный Читальный зал – БиблиоТех» <https://biblio.asu-edu.ru> Учётная запись образовательного портала АГУ
9. Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента» [www.studentlibrary.ru](http://www.studentlibrary.ru) Регистрация с компьютеров АГУ
10. Единое окно доступа к образовательным ресурсам <http://window.edu.ru>
11. Министерство науки и высшего образования Российской Федерации <https://minobrnauki.gov.ru>
12. Министерство просвещения Российской Федерации <https://edu.gov.ru>

## 7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

### 7.1. Паспорт фонда оценочных средств

При проведении текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине «Проблемы экологии на стыке математики, физики и химии» проверяется сформированность у обучающихся компетенций, указанных в разделе 3 настоящей программы. Этапность формирования данных компетенций в процессе освоения образовательной программы определяется последовательным освоением дисциплин и прохождением практик, а в процессе освоения дисциплины – последовательным достижением результатов освоения содержательно связанных между собой разделов, тем.

**Таблица 6 – Соответствие разделов, тем дисциплины, результатов обучения по дисциплине и оценочных средств**

Контролируемый раздел, тема дисциплины	Код контролируемой компетенции	Наименование оценочного средства
Раздел 1. Предмет изучения экологических проблем на стыке наук		
Тема 1. Актуальные направления современной экологии, проблемы: междисциплинарных подход в решении экологических задач.	УК-1	Отчет по заданиям для самоконтроля в <a href="http://moodle.asu-edu.ru">moodle.asu-edu.ru</a> Подготовка презентаций
Раздел 2. Взаимодействие физики и экологии		
Тема 2. Роль физики в оценке влияния деятельности человека на окружающую среду и решении экологических проблем.	УК-1	Отчет по лабораторно-вычислительной работе №2 Дискуссия
Раздел 3. Взаимодействие математики и экологии		
Тема 3. Роль статистических методов на разных этапах анализа.	УК-1	Отчет по лабораторно-вычислительной работе №3 Дискуссия
Раздел 4. Взаимодействие химии и экологии. Метаболические превращения в объектах окружающей среды		
Тема 4.1. Основные понятия экологической химии и современные проблемы.	УК-1	Отчет по лабораторно-вычислительной работе №4 Дискуссия
Тема 4.2 Основы действия токсикантов на биологические структуры.	УК-1	Отчет по лабораторно-вычислительной работе №5 Дискуссия
Раздел 5. Междисциплинарный подход в экологии. Альтернативные способы моделирования экологического состояния систем.		
Тема 5.1 Общее понятие модели, классификация	УК-1	Отчет по заданиям для

моделей по способам реализации: абстрактные (вербальные, знаковые, математические), материальные. Примеры из экологии, химии и биохимии.		самоконтроля в <a href="http://moodle.asu-edu.ru">moodle.asu-edu.ru</a> Подготовка презентаций
--	--	---

## 7.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций, описание шкал оценивания:

**Таблица 7 – Показатели оценивания результатов обучения в виде знаний**

Шкала оценивания	Критерии оценивания
5 «отлично»	демонстрирует глубокое знание теоретического материала, умение обоснованно излагать свои мысли по обсуждаемым вопросам, способность полно, правильно и аргументированно отвечать на вопросы, приводить примеры
4 «хорошо»	демонстрирует знание теоретического материала, его последовательное изложение, способность приводить примеры, допускает единичные ошибки, исправляемые после замечания преподавателя
3 «удовлетворительно»	демонстрирует неполное, фрагментарное знание теоретического материала, требующее наводящих вопросов преподавателя, допускает существенные ошибки в его изложении, затрудняется в приведении примеров и формулировке выводов
2 «неудовлетворительно»	демонстрирует существенные пробелы в знании теоретического материала, не способен его изложить и ответить на наводящие вопросы преподавателя, не может привести примеры

**Таблица 8 – Показатели оценивания результатов обучения в виде умений и владений**

Шкала оценивания	Критерии оценивания
5 «отлично»	демонстрирует способность применять знание теоретического материала при выполнении заданий, последовательно и правильно выполняет задания, умеет обоснованно излагать свои мысли и делать необходимые выводы
4 «хорошо»	демонстрирует способность применять знание теоретического материала при выполнении заданий, последовательно и правильно выполняет задания, умеет обоснованно излагать свои мысли и делать необходимые выводы, допускает единичные ошибки, исправляемые после замечания преподавателя
3 «удовлетворительно»	демонстрирует отдельные, несистематизированные навыки, испытывает затруднения и допускает ошибки при выполнении заданий, выполняет задание по подсказке преподавателя, затрудняется в формулировке выводов
2 «неудовлетворительно»	не способен правильно выполнить задание

## 7.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности:

### *1. Предмет изучения экологических проблем на стыке наук*

#### *1. Примерный перечень тематических вопросов для подготовки презентаций*

- а) Роль и место экологии как современной междисциплинарной науки в естествознании. Объекты и методы исследования современной экологии.
- б) Уровни организации живой материи, изучаемые в экологии. Современная концепция экологии. Основные понятия и термины.

в) Актуальные направления современной экологии, проблемы: междисциплинарных подход в решении экологических задач.

## ***Тема 2. Математическая обработка экспериментальных результатов***

### ***1. Вопросы для дискуссии в рамках лабораторной работы***

- 1) Каковы основные направления использования математической обработки результатов химического (биологического) эксперимента?
- 2) Для чего необходимо проводить математическую обработку результатов химического (биологического) эксперимента?
- 3) Какова цель математической обработки результатов химического (биологического) эксперимента?
- 4) Назовите задачи математической обработки результатов химического (биологического) эксперимента?
- 5) Каковы источники ошибок количественного анализа?
- 6) Приведите классификацию ошибок анализа.
- 7) Охарактеризуйте систематическую ошибку анализа.
- 8) Охарактеризуйте случайную ошибку анализа.
- 9) Чем обусловлены грубые ошибки анализа?
- 10) Какие цифры называют значащими при обработке результатов анализа?

### ***2. Взаимодействие физики и экологии***

#### ***1. Вопросы для дискуссии в рамках лабораторной работы***

1. Роль физики в решении экологических проблем загрязнения атмосферы: её состав и физические параметры. Искусственные источники загрязнения при авиаполётах, запусках космических аппаратов, наличие космического мусора. Физические методы и модели уменьшения и очистки газопылевых выбросов.
2. Роль физики в решении экологических проблем загрязнения воды: распространение загрязняющих веществ в воде. Понятие о предельной допустимой концентрации. Влияние нефтяной плёнки на жизнь в водоёме. Физические основы работы очистных сооружений.
3. Традиционные источники энергии: органическое топливо и загрязнение окружающей среды при его сжигании. Проблема истощаемости ресурсов углеродистых энергоносителей. Экологическая характеристика и перспективность ядерной энергетики. Опасность аварий на ядерных реакторах и меры их предотвращения.
4. Нетрадиционные источники энергии: Ветроэлектростанции. Приливно-отливная энергетика. Гелиоэнергетика, её потенциал и экологические проблемы. Геотермальная энергетика. Возобновляемые источники энергии в энергетике настоящего и будущего.
5. Современные грантовые исследования в области разработок аппаратуры, методов регистрации, локализации загрязнений и уменьшения рисков возникновения чрезвычайных ситуаций.

### **Лабораторно-вычислительной работы № 1 Прогноз возможного загрязнения подземных вод**

### 1.1. Методика расчёта

Прогноз изменения качества подземных вод включает две основные оценки:

- времени достижения стоками уровня грунтовых вод;
- концентрации загрязняющих веществ в грунтовых водах под орошаемым массивом.

Время ( $T$ , сут) достижения стоками уровня грунтовых вод под орошаемым массивом оценивается по формуле:

$$T = \frac{A \cdot H}{q^{2/3} \cdot k}, \quad (1.1)$$

где  $H$  – мощность зоны аэрации (глубина залегания уровня грунтовых вод), м;  $A$  – пористость грунтов зоны аэрации в долях единицы;  $k$  – коэффициент фильтрации грунтов зоны аэрации, м/сут;  $q$  – удельный расход стоков, подаваемый на орошение, м/сут.

Удельный расход определяется по формуле:

$$q = \frac{Q_c}{F}, \quad (1.2)$$

где  $Q_c$  – общий расход подаваемых стоков, м<sup>3</sup>/сут;  $F$  – площадь орошаемого массива, м<sup>2</sup>.

Формула (1.1) применима для условия орошения дождеванием при основном условии полива  $k \geq q$ , т. е. происходит свободная фильтрация стоков без образования луж на поверхности поля. Если зона аэрации имеет неоднородный характер, то время  $T$  рассчитывается для каждого слоя в отдельности и складывается.

Сравнивая полученное время  $T$  с временем выживаемости бактерий (порядка 100...400 сут), оценивают возможность попадания микроорганизмов в грунтовые воды и возникновения их бактериального загрязнения.

Прогнозный расчёт концентрации загрязняющих веществ (нитратов) в грунтовых водах проводится с учётом их начального объёма под массивом орошения ( $W_0, \text{м}^3$ ), объёма профильтровавшихся сточных вод ( $W_\phi, \text{м}^3$ ), объёма просочившихся атмосферных осадков ( $W_p, \text{м}^3$ ).

Концентрация загрязняющих веществ (ЗВ) в грунтовых водах ( $C_1, \text{мг/дм}^3$ ) к концу первого года орошения определяется по формуле:

$$C_1 = \frac{W_0 \cdot C_0 + W_\phi \cdot C_\phi + W_p \cdot C_p}{W_0 + W_\phi + W_p}, \quad (1.3)$$

где  $C_0$  – начальная (фоновая) концентрация ЗВ в грунтовых водах,  $\text{мг/дм}^3$ ;  $C_\phi$ ,  $C_p$  – концентрация ЗВ в сточных водах и атмосферных осадках,  $\text{мг/дм}^3$ .

С требуемой для практики точностью значения величин  $C_0$  и  $C_p$  в расчётах можно принять равными нулю. При прямоугольной форме орошаемого поля начальный объём вместимости водоносного горизонта определяется как

$$W_0 = L \cdot S \cdot m \cdot A, \quad (1.4)$$

где  $L$  – длина поля, м;  $S$  – ширина поля, м;  $m$  – мощность водоносного горизонта, м;  $A$  – пористость грунтов зоны аэрации, в долях.

Величина  $W_\phi$  принимается в пределах 10...30% от годового объёма поданных на орошение стоков  $W_c$ , который, в свою очередь определяется умножением проектной оросительной нормы ( $M, \text{м}^3/\text{га}$ ) на площадь орошения ( $F, \text{га}$ ). Объём профильтровавшихся атмосферных осадков рассчитывается по формуле:

$$W_p = S \cdot L \cdot P_{\min} \cdot (1 - \mu), \quad (1.5)$$

где  $P_{\min}$  – минимальная норма годовых атмосферных осадков, м;  $(1 - \mu)$  – коэффициент просачивания атмосферных осадков.

Ввиду наличия естественного потока грунтовых вод, в течение межполивного периода происходит отжатие загрязнённых с концентрацией  $C_1$  вод вниз по потоку чистыми (фоновыми) грунтовыми водами. В последующие поливные периоды (годы) фильтрующие стоки опять смешиваются с грунтовыми водами, которые теперь состоят из двух частей: образовавшихся в предыдущий поливной период загрязнённых вод ( $\Delta W_{j-1}, \text{м}^3$ ) и чистых грунтовых вод ( $W_0, \text{м}^3$ ). Прогнозная оценка концентрации ЗВ в грунтовых водах к концу  $j$ -го года орошения выполняется с использованием зависимости

$$C_j = \frac{\Delta W_0 \cdot C_0 + \Delta W_{j-1} \cdot C_{j-1} + W_\phi \cdot C_\phi}{\Delta W_0 + \Delta W_{j-1} + W_\phi + W_p}, \quad (1.6)$$

где  $C_{j-1}$  – концентрация загрязняющих веществ в грунтовых водах к концу года, предшествующего расчётному, мг/дм<sup>3</sup>.

Объёмы  $\Delta W_0$  и  $\Delta W_{j-1}$  определяются с учётом скорости потока грунтовых вод:

$$\Delta W_0 = S \cdot v \cdot T_M \cdot m \cdot A; \quad (1.7)$$

$$\Delta W_{j-1} = S \cdot (L - v \cdot T_M) \cdot m \cdot A; \quad (1.8)$$

$$v = k \cdot i / A \quad (1.9)$$

где  $k$  – коэффициент фильтрации водоносного слоя, м/сут;  $i$  – уклон (градиент) потока грунтовых вод;  $T_M$  – продолжительность межполивного интервала (октябрь – апрель), сут;  $v$  – скорость потока, м/сут.

Расстояние, проходимое загрязнёнными водами в течение каждого года вниз по потоку, определяется умножением скорости потока ( $v$ , м/сут) на число суток в году.

При наличии водозаборных скважин, расположенных вблизи орошаемого массива, но выше по потоку грунтовых вод, выполняется прогноз подтягивания к ним загрязнённых вод. Подтягивание произойдёт, если радиус области питания скважины превысит расстояние до санитарного контура орошаемого массива. Радиус питания скважины ( $x_{ск}$  м) рассчитываются по формуле:

$$x_{ск} = \frac{Q}{2\pi \cdot m \cdot k \cdot i}; \quad (1.10)$$

где  $Q$  – дебит водозаборной скважины, м<sup>3</sup>/сут.

## Задание

Требуется:

- рассчитать время достижения уровня грунтовых вод сточными водами;
- определить концентрацию загрязняющих веществ под массивом орошения на  $j$ -й год после начала орошения;
- дать прогноз распространения загрязнения по водоносному горизонту и возможности его подтягивания к подземным водозаборам.

Таблица.

Параметры	Варианты					
	1	2	3	4	5	6
$q$ , м/сут $10^{-4}$	93	70	28	69	65	49
$k$ , м/сут $10^{-3}$	406	634	434	496	221	345
$H$ , м	3	4	2	5	6	3
$A$ , $10^{-2}$	34	40	26	48	60	56
$m$ , м	9	10	8	14	15	6
$L/S$ , м/м	570	460	350	600	580	560
	590	580	610	600	570	580
$C_\phi$ , мг/дм <sup>3</sup> $10^{-2}$	16	32	17	45	28	29
$i$ $10^{-2}$	40	26	56	48	24	25
$Q$ , м <sup>3</sup> /сут	340	410	280	390	280	370

### 3. Взаимодействие математики и экологии.

#### Роль статистических методов на разных этапах анализа

##### 1. Вопросы для дискуссии в рамках лабораторной работы

- а) Источники и вид представления экспериментальных данных. Примеры расчетных схем в различных физико-химических, токсикологических, биохимических методах исследования.
- б) Характеристика систематических ошибок, случайные ошибки методов анализа. Статистическая обработка результатов измерений.
- в) Кривая распределения результатов. Функция распределения, математическое ожидание, дисперсия и другие параметры.
- г) Метод наименьших квадратов и реализация в программных приложениях (Microsoft Office, OpenOffice.org Calc, SciDAVis). Оценка параметров. Таблично заданные функции и их интерполяция.

#### Лабораторно-вычислительной работы № 2

##### Построение линейной регрессии в EXCEL

##### с использованием надстройки «АНАЛИЗ ДАННЫХ»

Цель: Научиться строить модель линейной регрессии с несколькими влияющими факторами.

Построение линейной регрессионной модели делает возможным осуществлять прогноз и дальнейшее планирование эксперимента. Это наиболее распространенный способ демонстрации закономерности какой-то переменной от других.

Модель линейной регрессии имеет вид:  $Y = a_0 + a_1x_1 + \dots + a_kx_k$

где  $a$  – параметры (коэффициенты) регрессии,  $x$  – влияющие факторы,  $k$  – количество факторов модели.

Исходные данные: числовой набор данных основного параметра  $Y$ , а также количество величин показателей, влияние которых изучается в модели  $X$ .

Оборудование и методическое обеспечение: компьютерный класс, Microsoft Office 2013, раздаточный материал по вычислительному практикуму.

### Тема 4. Взаимодействие химии и экологии. Метаболические превращения в объектах окружающей

#### 4.1. Основные понятия экологической химии и современные проблемы.

##### 1. Вопросы для дискуссии в рамках лабораторной работы

1. Химический экологический фактор и химическое загрязнение. Закон толерантности. Жизненно необходимые химические элементы. Химическое загрязнение. Химический состав живых организмов. Неорганические, органические и металлоорганические вещества. Углеводороды, галогенпроизводные углеводородов, альдегиды, диоксины, нитросоединения.
2. Экологическая химия атмосферы. Пыль и аэрозоли. Основные типы химических процессов в атмосфере. Фотохимические реакции. Свободные радикалы. Парниковые газы. Влияние кислотных дождей на различные объекты. Смог, его типы и особенности образования. Экологохимические проблемы атмосферы и ее защита.
3. Экологическая химия гидросферы: классификация химического состава природных вод. Поверхностные природные воды. Свойства природных вод и их качество. Особенности химических процессов в гидросфере.
4. Экологическая химия гидросферы: процессы самоочищения водоемов. Цикл пероксида водорода, его экологическая роль в гидросфере. Донные отложения, их экологическая роль в водоеме. Поведение соединений азота и фосфора в поверхностных водоемах. Загрязнение водоемов веществами органического характера. Очистка загрязненных вод.
5. Экологическая химия литосферы. Состав почвы и процессы, происходящие в ней. Почвенные процессы с участием микроорганизмов. Физико-химические процессы. Адсорбция. Катионный обмен. Эрозия и засоление почв. Поллютанты почвы и их поведение.

Удобрения, пестициды. Поведение пестицидов в почвах. Поведение тяжелых металлов и их соединений в почвах. Эколого-химические проблемы почвенного покрова.

6. Экологическая химия биосферы: Биологическая миграция химических элементов. Биогеохимические циклы азота, фосфора, углерода, металлов. Химические процессы в биосфере. Особенности химических процессов в биосфере. Действие химических факторов на организмы. Хемомедиаторы (химические экорегуляторы). Поллютанты, их клеточные мишени. Виды токсического действия поллютантов.

### Лабораторно-вычислительной работы № 4

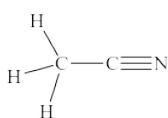
#### Проведение диагностики макромолекулярных систем с использованием квантово-химических методов исследования

##### 1. Индивидуальные задания вычислительного эксперимента

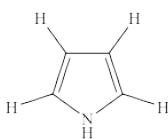
Составление молекулярных диаграмм для несложных молекул и предсказания их реакционной способности с применением метода молекулярных орбиталей Хюккеля и с помощью полуэмпирических и неэмпирических методов. Нахождение порядков связей, индексов свободной валентности, распределения зарядов и других структурных и энергетических параметров.

#### Варианты

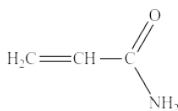
метилциан



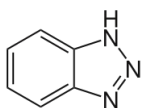
пиррол



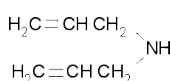
акриламида



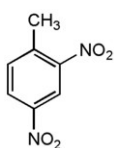
бензотриазол



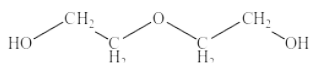
диаллиламин



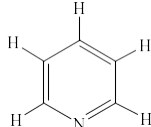
2,4-динитротолуол



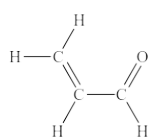
\*Диэтиленгликоль



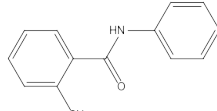
пиридин



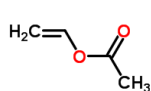
акролеин



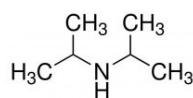
салициланилид



винилацетат

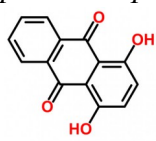


\*диизопропиламин



\*1,4-

дигидроксиантрахинон

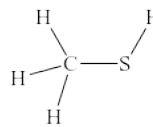


\*2,3,7,8-

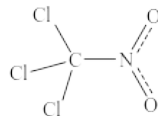
тетрахлордифензофуран



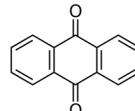
метилмеркаптан



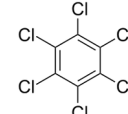
хлорпикрин



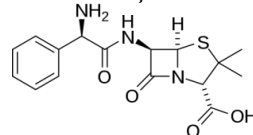
антрахинон



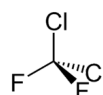
гексахлорбензол



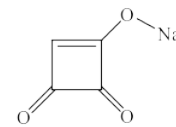
\*ампициллин



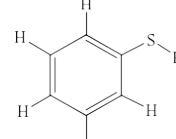
дифтордихлорметан



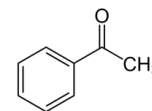
монилиформин



фенилмеркаптан



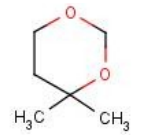
ацетофенон



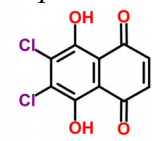
гидразин



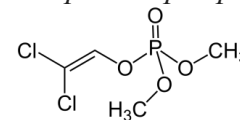
\*диметилдиоксан



\*2,3-Дихлор-1,4-нафтохинон



\*O,O-диметил-O-2,2-дихлорвинилфосфат



**Примерный план отчета индивидуального задания**

1. Цель и задачи исследования.
2. Способы реализации, методы исследования.
3. Составление молекулярной диаграммы, графические иллюстрации.
4. Основные положения и математический аппарат.
5. Анализ теоретически полученных данных, описание реакционной способности молекулы.
6. Анализ сведений о биологической активности соединения, токсичности и класса опасности, наличие антидотов, блокаторов.
7. Обобщенные выводы.

**Типовой макет отчета по заданиям к лабораторно-вычислительной работе**

1. Визуализация молекул осуществляется с использованием программ, имеющих бесплатное распространение в академических целях: MaSK (<http://ccmsi.us/mask/>); Avogadro (<https://avogadro.cc/>); Jmol (<http://jmol.sourceforge.net/>); RasMol (<http://www.openrasmol.org/>).
2. Сохранение оптимизированной молекулы в декартовых и во внутренних координатах по образцам:

Пространственное описание в декартовых координатах					
Тип	номер атома	Порядковый номер	$x$	$y$	$z$
	...	...	...	...	...

*Пространственное описание во внутренних координатах (z-матрица)*

Тип атома	№ атома	$r, \text{Å}$ (нм)	№ атома	$\theta, ^\circ$	№ атома	$\varphi, ^\circ$
...	...	...	...	...	...	...

3. Составление входного файла (.mor; .inp) для вычисления. Выполнить расчет, указанным методом. Для выполнения расчетов могут быть использованы следующие программы бесплатного распространения в академических целях: MOPAC (<http://openmopac.net/>); GAMESS (<https://www.msg.chem.iastate.edu/GAMESS/download/register/>). Примеры файлов, описание ключевых команд и, реализуемые методы вычисления программы GAMESS находятся в разделе (<https://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/documentation.html>), MOPAC (<http://openmopac.net/Manual/index.html>). Постановка задачи на расчет.
4. Обработка выходного файла (.out). Заполнить таблицу по образцу (заполнение ячеек согласно требованиям вычислительного практикума):

Структурные параметры молекулы				
длины связей, $r, \text{Å}$	валентные углы, $\theta, ^\circ$	торсионные углы, $\varphi, ^\circ$	заряд на атомах, $q, \text{a.e.z.}$	дипольный момент молекулы, $\mu$ , Дебай
				...
реакционного центра молекулы				среднеквадратичный градиент (RMS Gradient)
...	...	...	...	...
Энергетические параметры молекулы				
площадь молекулы, $S_{\text{cosmo}}, \text{Å}^2$	энергии граничных МО, $E_{\text{MO}}, \text{эВ}$		количество связывающих МО	
	ВЗМО (НОМО)	НСМО (LUMO)	...	
...	...	...	величина энергетической щели, эВ	
...	...	...	...	
объем молекулы, $V_{\text{cosmo}}, \text{Å}^3$	потенциал ионизации, $I, \text{эВ}$	общая энергия, $E_{\text{tot}}, \text{кДж/моль}$	теплота образования, $H_f, \text{кДж/моль}$	
...	...	...	...	

частоты колебаний функциональных групп, $\text{см}^{-1}$											
квантово-механические вычисления						экспериментальные (справочные)					
валентные - $\nu_s, \nu_{as}$			деформационные - $\delta$			валентные - $\nu_s, \nu_{as}$			деформационные - $\delta$		
...			...			...			...		
Термодинамические параметры молекулы											
энтальпия, H, кДж/моль			энтропия, S, Дж/(моль·K)			изобарно-изотермический потенциал, G, кДж/моль			теплоемкость, $C_p/C_v$ , Дж/(моль·K)		
273K	298K	318K	273K	298K	318K	273K	298K	318K	273K	298K	318K
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...

5. Построение графика зависимости «Среднеквадратичного градиента (или Общей энергии) от количества шагов оптимизации ( $n$ )» для равновесной структуры молекулы.
6. Сопоставить результаты расчетов с экспериментальными (справочными) данными. Указать наилучшую сходимость полученных данных с результатами эксперимента.
7. Сделать вывод о структуре и реакционной способности молекул. Установить активные центры в структурах.

#### Общие требования к выполнению и отчету лабораторно-вычислительной работы

Работа считается выполненной, если построены молекулярные диаграммы молекул, приведены необходимые расчеты геометрических и энергетических параметров, проанализированы свойства, сделаны соответствующие выводы реакционной способности изучаемого соединения и представлены сведения о биологической активности, токсичности вещества, данные о существующих антидотах или блокаторах.

### Тема 4.2 Основы действия токсикантов на биологические структуры

#### Лабораторно-вычислительной работы № 5

#### Моделирование межмолекулярных взаимодействий

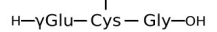
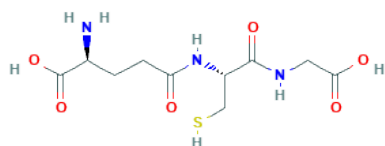
#### Задание:

Моделирование контактных взаимодействий между токсикантами и модельными структурными фрагментами – три-, тетра-, пента-, гекса-, гептапепид, фосфолипиды. Анализ энергетических и структурных параметров моделируемых систем. Поиск наиболее активной функциональной группы в структуре модельного компонента.

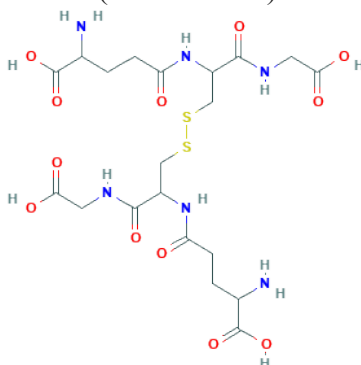
#### Варианты трипептиды

#### Глутатион

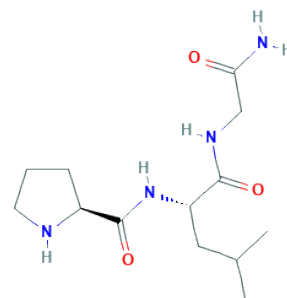
H-gGlu-Cys-Gly-OH  
PubChem CID: 124886  
(восстановленный)



PubChem CID: 975  
(окисленный)



Меланостатин  
H-Pro-Leu-Gly-NH<sub>2</sub>  
PubChem CID: 92910

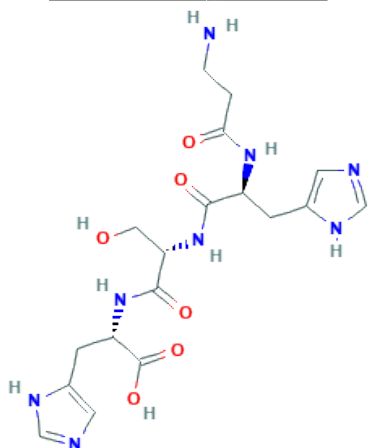


#### тетрапептиды

H-βAla-His-Ser-His-OH

H-Gly-Glu-Lys-Gly-OH

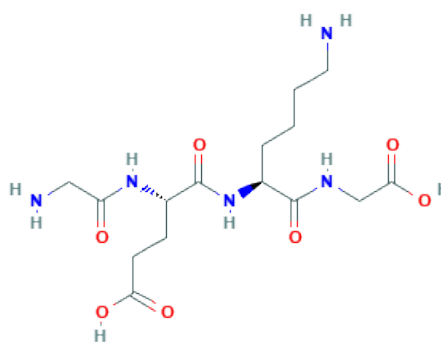
PubChem CID: 71587844



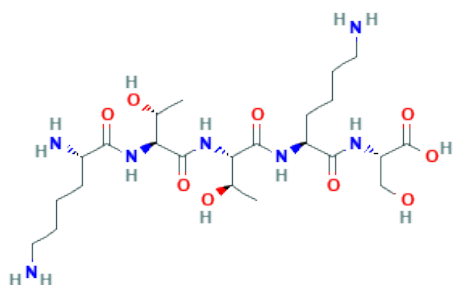
H-Lys-Thr-Thr-Lys-Ser-OH  
PubChem CID: 9959565

*пентапептиды*

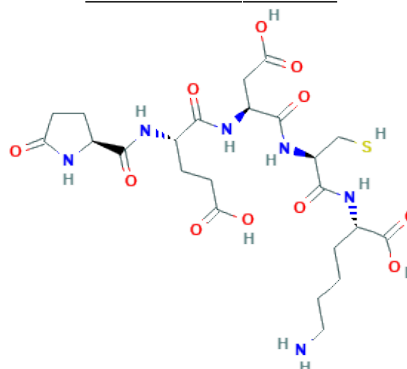
PubChem CID: 42630677



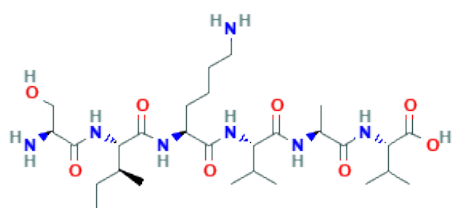
H-Pyr-Glu-Asp-Cys-Lys-OH  
PubChem CID: 123651



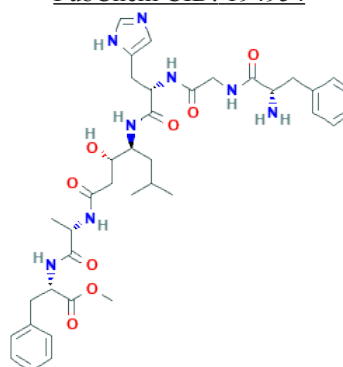
H-Ser-Ile-Lys-Val-Ala-Val-OH  
PubChem CID: 10145673

*гексапептиды*

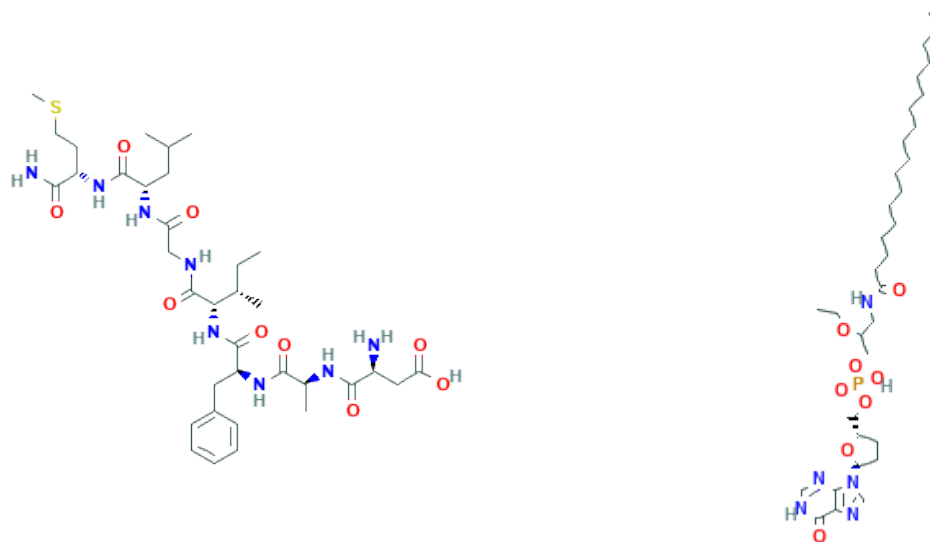
H-Phe-Gly-His-Sta-Ala-Phe-OMe  
PubChem CID: 194954



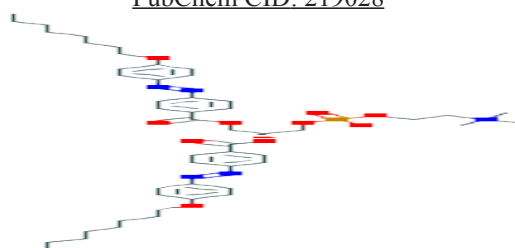
*гептапептид*  
H-Asp-Ala-Phe-Ile-Gly-Leu-Met-NH<sub>2</sub>  
PubChem CID: 5748244



*фосфолипиды*  
C<sub>33</sub>H<sub>58</sub>N<sub>3</sub>O<sub>8</sub>P  
PubChem CID: 135538722



фосфолипиды  
 $C_{50}H_{68}N_5O_{10}P$   
 PubChem CID: 219028



### Примерный план отчета

1. Цель и задачи исследования.
2. Способы реализации, методы исследования.
3. Составление молекулярной диаграммы, систем межмолекулярных взаимодействий, графические иллюстрации.
4. Анализ вычисленных данных и установление активных функциональных групп в модельном фрагменте.
5. Обзор сведений о модельном фрагменте (место локализации, основные функции).
6. Обобщенные выводы: о функциональной активности выбранной модели фрагмента клеточной мембраны, о наличии или отсутствии потенциальных мишеней на поверхности модельной системы, о подборе потенциального антидота к токсичной молекуле.

### Типовой макет отчета

1. Визуализация модельного фрагмента (*n*-пептид, фосфолипид) осуществляется с использованием программ, имеющих бесплатное распространение в академических целях: MaSK (<http://ccmsi.us/mask/>); Avogadro (<https://avogadro.cc/>); Jmol (<http://jmol.sourceforge.net/>); RasMol (<http://www.openrasmol.org/>).
2. Сохранение оптимизированного модельного фрагмента (*n*-пептид, фосфолипид) в декартовых и во внутренних координатах по образцам:

Пространственное описание в декартовых координатах					
Тип	номер атома	Порядковый номер	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
	...	...	...	...	...

Пространственное описание во внутренних координатах ( <i>z</i> -матрица)						
Тип атома	№ атома	<i>r</i> , Å (нм)	№ атома	$\theta$ , °	№ атома	$\varphi$ , °
	...	...	...	...	...	...

3. Составление входного файла (.mor; .inp) для вычисления. Выполнить расчет, указанным методом. Для выполнения расчетов могут быть использованы следующие программы бесплатного распространения в академических целях: MOPAC (<http://openmopac.net/>); GAMESS (<https://www.msg.chem.iastate.edu/GAMESS/download/register/>). Примеры файлов, описание ключевых команд и, реализуемые методы вычисления программы GAMESS находятся в разделе (<https://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/documentation.html>), MOPAC (<http://openmopac.net/Manual/index.html>). Постановка задачи на расчет.
4. Обработка выходного файла (.out). Модельная система иллюстрирует контактное взаимодействие между молекулой токсиканта и модельным фрагментом (*n*-пептид, фосфолипид) клеточной мембраны. Заполнить таблицу по образцу:

<i>Структурные и энергетические параметры модельной системы</i>								
длины связей, r, Å	валентные углы, θ, °		торсионные углы, φ, °		заряд на атомах, q, а.е.з.		среднеквадратичный градиент (RMS Gradient)	
реакционного центра в модельной системе							количество связывающих МО	
...	...		...		...		...	
площадь системы, S <sub>cosmo</sub> , Å <sup>2</sup>	энергии граничных МО, E <sub>МО</sub> , эВ				величина энергетической щели, эВ			
	ВЗМО (НОМО)		НСМО (LUMO)		...			
...	...		...		теплота образования, H <sub>f</sub> , кДж/моль			
объем системы, V <sub>cosmo</sub> , Å <sup>3</sup>	потенциал ионизации, I, эВ				...			
	...				общая энергия, E <sub>tot</sub> , кДж/моль			
...				...				...
<i>Частоты колебания функциональных групп в реакционном центре, см<sup>-1</sup></i>								
квантово-механические вычисления					экспериментальные (справочные)			
валентные - ν <sub>s</sub> , ν <sub>as</sub>		деформационные - δ			валентные - ν <sub>s</sub> , ν <sub>as</sub>		деформационные - δ	
...		...			...		...	
<i>Термодинамические параметры модельной системы</i>								
изменение энтальпии, ΔH, кДж/моль			изменение энтропии, ΔS, Дж/(моль·К)			изменение изобарно-изотермического потенциала, ΔG, кДж/моль		
273K	298K	318K	273K	298K	318K	273K	298K	318K
...	...	...	...	...	...	...	...	...

5. Построение графика зависимости «Среднеквадратичного градиента (или Общей энергии) от количества шагов оптимизации (*n*)» для равновесной модельной системы.
6. Анализ термодинамики процесса взаимодействия в модельной системе. Выводы о потенциальных мишенях в модельном фрагменте и энергетике процессов.
7. Построение корреляционных зависимостей в модельных системах «Структура – Свойство», «Структура – Активность».

### **Общие требования к выполнению и отчету лабораторно-вычислительной работы**

Работа считается выполненной, если составлены системы межмолекулярных взаимодействий, заполнена таблица структурных, энергетических и термодинамических параметров, сделаны выводы об активности потенциальных мишеней в модельном фрагменте, построены корреляционные зависимости «Структура – Свойство», «Структура – Активность» и сделаны соответствующие выводы.

**Тема 5.1 Общее понятие модели, классификация моделей по способам реализации: абстрактные (вербальные, знаковые, математические), материальные. Примеры из экологии, химии и биохимии**

**Примерный перечень тематических вопросов для подготовки презентаций**

1. Имитационные модели как инструмент исследования реальных экологических систем.
2. Иерархия моделей в экологии.
3. Итерационная процедура построения имитационных моделей.
4. Разработка концептуальной модели на основе предварительных литературных и экспериментальных данных.
5. Структурная идентификация математической модели.
6. Проверка качества аппроксимации экспериментальных данных, использованных для поиска коэффициентов модели. Проверка адекватности модели по независимым экспериментам. Анализ чувствительности модели по параметрам.
7. Использование разработанной модели как инструмента для исследования экосистем.
8. Системный подход и системный анализ.
9. Роль и место математического моделирования в организации системных исследований.

**Перечень вопросов и заданий,  
выносимых на экзамен / зачёт / дифференцированный зачёт**

**Типовой перечень вопросов к экзамену**

1. Цель и задачи обработки результатов эксперимента.
2. Метрология как основа обработки результатов эксперимента.
3. Измерения в химии, биологии, физики. Ошибки измерений.
4. Класс точности средств измерений. Характеристика средств измерений.
5. Правильность и воспроизводимость результатов количественного анализа.
6. Классификация ошибок количественного анализа.
7. Грубые промахи.
8. Расчет метрологических параметров.
9. Сравнение методов анализа по воспроизводимости.
10. Метрологическая характеристика методов анализа по правильности.
11. Оценка допустимого расхождения результатов параллельных определений.
12. Линейный метод наименьших квадратов.
13. Линейная корреляция и коэффициент корреляции.
14. Предел обнаружения.
15. Поступление в окружающую среду и содержание токсикантов в природных средах. Поведение в окружающей среде и модельных системах.

Таблица 9 – Примеры оценочных средств с ключами правильных ответов

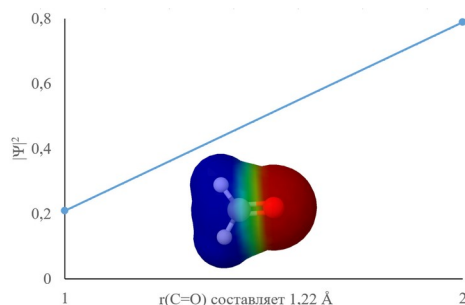
№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
<b>УК-1 – Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач</b>				
I.	Задание закрытого типа	Выберите один (или несколько) правильный вариант ответа:  Требуется получить выборку по свойствам токсичных веществ, опасных химических и биологических веществ канцерогенного и мутагенного происхождения. Какие базы данных Вы можете использовать для	а, б, г	1

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
		<p>получения информации (возможно несколько вариантов ответа):</p> <p>а) NLM  <a href="https://chem.nlm.nih.gov/chemidplus/">https://chem.nlm.nih.gov/chemidplus/</a>;</p> <p>б) PubChem  <a href="https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/">https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/</a>;</p> <p>в) ChemCAD  <a href="https://www.chemstations.com/">https://www.chemstations.com/</a>;</p> <p>г) Регистр и базы данных Роспотребнадзора  <a href="https://www.rpohv.ru/db/">https://www.rpohv.ru/db/</a>;</p> <p>д) Open Babel <a href="http://openbabel.org/">http://openbabel.org/</a>;</p> <p>е) Blender <a href="https://www.blender.org/">https://www.blender.org/</a></p>		
2.		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>При вычислении индексов реакционные способности метод Фукуи основан на вычислении:</p> <p>а) межъядерного расстояния и валентного угла в структурах реагентов;</p> <p>б) точечных зарядов на гетероатомах в структуре реагента;</p> <p>в) дипольного момента и низшей свободной молекулярной орбитали реагентов</p> <p>г) высшей занятой и низшей свободной молекулярной орбитали реагентов</p>	г	1
3.		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Укажите правильный вид расчета декартовых координат для молекул с <math>sp^2</math>-гибридизацией и <math>sp</math> – гибридизацией:</p> <p>а) <math display="block">\begin{cases} x = r \cdot \cos(\varphi) \\ y = r \cdot \sin(\varphi) \\ z = 0 \end{cases}</math></p> <p>б) <math display="block">\begin{cases} x = r \cdot \sin(\theta) \\ y = r \cdot \sin(\theta) \\ z = r \cdot \cos(\theta) \end{cases}</math></p> <p>в) <math display="block">\begin{cases} x = r \cdot \sin(\theta) \cdot \cos(\varphi) \\ y = r \cdot \sin(\theta) \cdot \sin(\varphi) \\ z = r \cdot \cos(\theta) \end{cases}</math></p>	а	1
4.		Выберите один правильный вариант	в	1

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
		<p>ответа:</p> <p>Метаданные – ...</p> <p>а) некоторый набор операций над базой данных, который рассматривается как единственное завершено, с точки зрения пользователя, действие над некоторой информацией, обычно связано с обращением к базе данных;</p> <p>б) разновидность систем хранения, ориентирована на поддержку процесса анализа данных целостность, обеспечивает, непротиворечивость и хронологию данных, а также высокую скорость выполнения аналитических запросов;</p> <p>в) высокоуровневые средства отражения информационной модели и описания структуры данных;</p> <p>г) это установление зависимости дискретной выходной переменной от входных переменных</p>		
5.		<p>Выберите один правильный вариант ответа:</p> <p>Для реакции <math>2\text{CO}_2 \rightarrow 2\text{CO} + \text{O}_2 \uparrow</math> кинетическая модель для молекулы образовавшегося вещества В в реакции запишется в виде:</p> <p>а) <math>\frac{dc_B}{dt} = 2k \cdot c_A^2</math></p> <p>б)</p> <p>в) <math>\frac{dc_B}{dt} = -k \cdot c_A \cdot c_C</math></p>	а	1
6.	Задание открытого типа	<p>Запишите развернутый ответ:</p> <p>Основные отличия мутагенности от канцерогенности?</p>	<p>Мутагенность - способность к мутационным наследственным изменениям. это свойства некоторых химических, физических и биологических факторов самостоятельно или в комплексе с др. факторами вызывать или содействовать развитию злокачественных</p>	5

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
			новообразований. Подобные факторы называются канцерогенными, а процесс возникновения опухолей в результате их воздействия – канцерогенезом.	
7.		<p>Запишите развернутый ответ:</p> <p>Ниже приведен список онлайн открытых электронных ресурсов. Установите какая база данных решает фармакопейные медицинские задачи и опишите типовой протокол?</p> <p>а) ChemSpider -<a href="http://www.chemspider.com/">http://www.chemspider.com/</a></p> <p>б) Chemical Synthesis -<a href="https://www.chemsynthesis.com/">https://www.chemsynthesis.com/</a></p> <p>в) Milk Composition Database -<a href="https://mddb.ca/">https://mddb.ca/</a></p> <p>г) Crystallography Open Database -<a href="http://www.crystallography.net/cod/">http://www.crystallography.net/cod/</a></p> <p>д) DrugBank - <a href="https://go.drugbank.com/">https://go.drugbank.com/</a></p>	<p>База данных DrugBank лекарственных веществ с химической, фармакологической и фармацевтической информацией. Типовой протокол имеет структурные характеристики соединения, физико-химические параметры, спектральные характеристики, лекарственные и пищевые взаимодействия, биомедицинские назначения, целевые последовательности, фармакономику и многое другое. В базе данных можно проводить перекрестную оценку взаимодействия лекарственных препаратов, в случае, если подобные исследования были проведены и имеются данные в базе данных DrugBank</p>	5
8.		<p>Запишите развернутый ответ:</p> <p>Ниже приведен список онлайн открытых электронных ресурсов. Установите какая база данных содержит данные о токсической оценке влияния нефти и нефтепродуктов на обитателей морской флоры и фауны? Опишите типовой протокол.</p>	<p>Открытый ресурс Chemical Aquatic Fate and Effects (CAFE) предназначен для скорейшего реагирования при разливах нефти и нефтепродуктов в качестве</p>	5-8

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
		ADIOS Database - <a href="https://adios.orr.noaa.gov/oils">https://adios.orr.noaa.gov/oils</a> Chemical Synthesis - <a href="https://www.chemsynthesis.com/">https://www.chemsynthesis.com/</a> CAFE Database - <a href="https://cafe.orr.noaa.gov/">https://cafe.orr.noaa.gov/</a> ExxonMobil - <a href="https://corporate.exxonmobil.com/Crude-oils/Crude-trading/Assays-available-for-download">https://corporate.exxonmobil.com/Crude-oils/Crude-trading/Assays-available-for-download</a>	инструмента, помогающего ликвидаторам при оценке воздействия разливов на водную среду в ситуациях, когда необходимо принимать важные решения в течение нескольких часов после разлива. В базе данных собраны сведения о микроорганизмах и о влиянии на них разлитых химикатов, о потенциальном воздействии на водные рецепторы. Для этого достаточно указать тип месторождения нефти и выбрать сценарий. Далее в таблице будут выведены сведения о токсичной опасности на кораллы, ракообразные, рыб, моллюсков и других микроорганизмов.	
9.		Запишите развернутый ответ:  Ниже представлена графическая зависимость « $ \Psi ^2 - r(C=O)$ » для молекулы формальдегида. Результаты получены с использованием расширенного метода МО Хюккеля. Поясните, о чем свидетельствуют значения на графике? Запишите вид полной волновой функции МО для HCOH.	На графике точка максимума соответствует наибольшей вероятности $ \Psi ^2$ пребывания электронов у второго атома в молекуле формальдегида. То есть электронная плотность смещена к кислороду, в противовес, минимальная плотность концентрируется у первого атома углерода. В рамках метода Хюккеля волновая функция молекулярной орбитали строится	5-8



№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
			<p>как линейная комбинация волновых функций атомных орбиталей.</p> $ \Psi ^2 = (c_1\varphi_1)^2 + (c_2\varphi_2)^2 = 0,2\cdot\varphi_1^2 + 0,8\cdot\varphi_2^2$ <p>откуда:</p> $\Psi_{\text{НСОН}} = 0,447\cdot\varphi_1 + 0,894\cdot\varphi_2$	
10.	Задания комбинированного типа	<p>Запишите развернутый ответ:</p> <p>Ниже приведен список онлайн открытых электронных ресурсов. Установите какая база данных содержит сведения о физико-химических свойствах нефти и нефтепродуктов (масел)? Опишите типовой протокол.</p> <p>ADIOS Database  <a href="https://adios.orr.noaa.gov/oils">-https://adios.orr.noaa.gov/oils</a>          Chemical Synthesis  <a href="https://www.chemsynthesis.com/">-https://www.chemsynthesis.com/</a>          CAFE Database  <a href="https://cafe.orr.noaa.gov/">-https://cafe.orr.noaa.gov/</a>          ExxonMobil          -  <a href="https://corporate.exxonmobil.com/Crude-oils/Crude-trading/Assays-available-for-download">https://corporate.exxonmobil.com/Crude-oils/Crude-trading/Assays-available-for-download</a></p>	<p>ADIOS Oil Database предназначена для поддержки операций по обеспечению готовности к внештатным ситуациям при разливе сырой нефти посредством компиляции общедоступных физико-химических свойств нефтей. Типовой протокол содержит сведения о названии месторождения нефти, идентификатор и параметры (температура застывания, плотность, точка возгорания, сведения по межфазному натяжению, динамической вязкости), данные о дистилляции, а также, приводится ссылка на цитируемую литературу.</p>	5-8
11.		<p>Запишите развернутый ответ:</p> <p>Период полураспада продуктов деления урана составляет: <math>^{85}\text{Kr}</math> – 10,3 года; <math>^{90}\text{Sr}</math> – 29,12 лет; <math>^{131}\text{I}</math> – 8,04 суток; <math>^{135}\text{Cs}</math> – 2,6·10<sup>6</sup> лет. В случае загрязнения территории указанными нуклидами быстрее всего спадет негативное влияние радиоактивного:</p> <p>а) йода          б) криптона          в) стронция</p>	<p>а</p> <p>На практике период полураспада определяют, измеряя активность исследуемого препарата через определённые промежутки времени. Методом радиоизотопного датирования</p>	3-5

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
		г) цезия. Каким методом регистрируют период полураспада?	фиксируют постоянство периода полураспада.	

#### 7.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине

Методические материалы составляют систему текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины, закрепляют виды и формы текущего контроля, сроки проведения, а также виды промежуточной аттестации по дисциплине, ее сроки и формы проведения. В системе контроля указывается процедура оценивания результатов обучения по данной дисциплине при использовании балльно-рейтинговой системы, показывается механизм получения оценки, основные положения БАРС, указывается система бонусов и штрафов, примерный набор дополнительных показателей.

Преподаватель, реализующий дисциплину, в зависимости от уровня подготовленности обучающихся может использовать иные формы, методы контроля и оценочные средства, исходя из конкретной ситуации.

**Таблица 10 – Технологическая карта рейтинговых баллов по дисциплине**

№	Контролируемые мероприятия	Количество мероприятий/баллы	Максимальное кол-во баллов	Срок представления
<b>Основной блок</b>				
1	Отчет по заданиям для самоконтроля в <a href="http://moodle.asu-edu.ru">moodle.asu-edu.ru</a>	2/5	10	По расписанию
2	Отчет по лабораторно-вычислительной работ в форме дискуссии	5/5	25	По расписанию
3	Подготовка презентаций	2/2,5	5	По расписанию
<b>Промежуточный контроль</b>			<b>40</b>	
<b>Блок бонусов</b>				
5	Портфолио студента (участие в международных конференциях, симпозиумах по направлению дисциплины и др. виды учебной и научной деятельности, подтвержденные дипломом, сертификатом) по направлению дисциплины	от 1 до 5 единиц	<b>10</b>	По расписанию
<b>Дополнительный блок</b>				
7	Экзамен	50 баллов	50	По расписанию
<b>ИТОГО</b>			<b>100</b>	<b>ЭКЗАМЕН</b>

**Таблица 11 - Система штрафов (для одного занятия)**

Показатели	Балл
Опоздание (более двух раз)	-2
Не готов(а) к занятию	-3
Нарушение учебной дисциплины	-2
Пропуск лекций без уважительной причины (за одно занятие)	-3

Пропуск практического занятия без уважительной причины (за одно занятие)	-3
Нарушение правил техники безопасности	-2

**Таблица 12 – Шкала перевода рейтинговых баллов в итоговую оценку за семестр по дисциплине**

Сумма баллов	Оценка по 4-балльной шкале
90–100	5 (отлично)
85–89	4 (хорошо)
75–84	
70–74	
65–69	3 (удовлетворительно)
60–64	
Ниже 60	2 (неудовлетворительно)

При реализации дисциплины в зависимости от уровня подготовленности обучающихся могут быть использованы иные формы, методы контроля и оценочные средства, исходя из конкретной ситуации.

## **8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

### **8.1. Основная литература**

- Исидоров В.А. Экологическая химия: учеб. пособ. для вузов ... спец. "Охрана окружающей среды и рациональное использование природных ресурсов". - СПб. : Химиздат, 2001. - 304 с.
- Математические методы решения химических задач : доп. УМО по клас. унив. образованию в качестве учеб. пособия для студентов вузов...по направ. подготовки "Химия" / А.И. Козко и др. - М.: Академия, 2013. - 368 с.
- Ложниченко О.В. Экологическая химия: учебное пособие для вузов / О.В. Ложниченко, И.В. Волкова, В.Ф. Зайцев – М.: Академия, 2008. 272 с.
- Фелленберг Г. Загрязнение природной среды. Введение в экологическую химию / пер. с нем. А.В. Очкина; Под ред. К.Б. Заборенко. - М. : Мир, 1997. - 232 с.
- Плетенёва Т.В., Токсикологическая химия [Электронный ресурс] / "Плетенева Т.В., Сыроешкин А.В., Максимова Т.В.; Под ред. Т.В. Плетенёвой" – М.: ГЭОТАР-Медиа, 2013. -512с. Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970426357.html>
- Калетина Н.И. Токсикологическая химия. Метаболизм и анализ токсикантов / Под ред. проф. Н.И. Калетиной - М.: ГЭОТАР-Медиа, 2008. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970406137.html>
- Калетина Н.И. Токсикологическая химия. Ситуационные задачи и упражнения / Н. И. Калетина - М. : ГЭОТАР-Медиа, 2007. - 352 с. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970405406.html>

### **8.2. Дополнительная литература**

- Наац В.И. Математические модели и численные методы в задачах экологического мониторинга атмосферы [Электронный ресурс] / Наац В.И., Наац И.Э. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785922111607.html>;
- Кокотушкин Г.А. Численные методы алгебры и приближения функций: метод. указания к выполнению лабораторных работ по курсу "Численные методы" [Электронный ресурс] /

- Г.А. Кокотушкин, А.А. Федотов, П.В. Храпов. - М.: Издательство МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2011. - 58 с. Режим доступа: [http://www.studentlibrary.ru/book/bauman\\_0006.html](http://www.studentlibrary.ru/book/bauman_0006.html)
3. С.А. Еремин и др. Токсикологическая химия. Аналитическая токсикология: учебник / Еремин С.А., Калетин Г.И., Калетина Н.И. и др. Под ред. Р.У. Хабриева, Н.И. Калетиной - М. : ГЭОТАР-Медиа, 2010. - 752 с. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970415375.html>
  4. Колок А. Современные яды: Дозы, действие, последствия / Колок А. - М. : Альпина Паблишер, 2017. - 215 с. - Текст: электронный // ЭБС "Консультант студента": [сайт]. - URL: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785961458688.html>
  5. Елисеева И.И. Практикум по общей теории статистики: учеб. пособие / И.И. Елисеева, Н.А. Флуд, М.М. Юзбашев; под ред. И.И. Елисеевой. - М.: Финансы и статистика, 2008. - 512 с.: ил. ISBN 978-5-279-02595-4 Интернет-ресурс: <http://www.studentlibrary.ru>
  6. Федоров А. А. и др. Методы химического анализа объектов природной среды / А.А. Федоров, Г.З. Казиев, Г.Д. Казакова. - М.: КолосС, 2008. - 118 с.: ил. - (Учебники и учеб. пособия для студентов высш. учеб. заведений). Интернет-ресурс: <http://www.studentlibrary.ru>

### 8.3. Интернет-ресурсы, необходимые для освоения дисциплины

1. Универсальная справочно-информационная полнотекстовая база данных периодических изданий ООО «ИВИС» <http://dlib.eastview.com>  
Имя пользователя: AstrGU  
Пароль: AstrGU
2. Электронный каталог Научной библиотеки АГУ на базе MARK SQL НПО «Информ-систем» <https://library.asu-edu.ru/catalog/>
3. Электронный каталог «Научные журналы АГУ» <https://journal.asu-edu.ru/>
4. Корпоративный проект Ассоциации региональных библиотечных консорциумов (АРБИКОН) «Межрегиональная аналитическая роспись статей» (МАРС) – сводная база данных, содержащая полную аналитическую роспись 1800 названий журналов по разным отраслям знаний. Участники проекта предоставляют друг другу электронные копии отсканированных статей из книг, сборников, журналов, содержащихся в фондах их библиотек <http://mars.arbicon.ru>
5. Электронная библиотечная система IPRbooks [www.iprbookshop.ru](http://www.iprbookshop.ru)
6. Электронно-библиотечная система BOOK.ru <https://book.ru>
7. Электронная библиотечная система издательства ЮРАЙТ, раздел «Легендарные книги» [www.biblio-online.ru](http://www.biblio-online.ru), <https://urait.ru/>
8. Электронная библиотека «Астраханский государственный университет» собственной генерации на платформе ЭБС «Электронный Читальный зал – БиблиоТех» <https://biblio.asu-edu.ru> Учётная запись образовательного портала АГУ
9. Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента» [www.studentlibrary.ru](http://www.studentlibrary.ru) Регистрация с компьютеров АГУ

## 9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Материально-техническое обеспечение учебной дисциплины включает в себя лекционную аудиторию, оснащенную проекционным оборудованием, экраном, ЭВМ с презентационным ПО и компьютерный класс для проведения практических и семинарских работ. В учебном процессе для освоения дисциплины используются следующие технические средства – компьютерное, мультимедийное оборудование для проведения практических занятий.

Рабочая программа дисциплины при необходимости может быть адаптирована для обучения (в том числе с применением дистанционных образовательных технологий) лиц с ограниченными возможностями здоровья, инвалидов. Для этого требуется заявление обучающихся, являющихся лицами с ограниченными возможностями здоровья, инвалидами,

или их законных представителей и рекомендации психолого-медико-педагогической комиссии. Для инвалидов содержание рабочей программы дисциплины может определяться также в соответствии с индивидуальной программой реабилитации инвалида (при наличии).