

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

_____ Носачев С.Б.

«04» апреля 2024 г.

УТВЕРЖДЕНО
Заведующий кафедрой ХМ

_____ Джигола Л.А.

«04» апреля 2024 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Вычислительные методы в химии»

Составитель

**Золотарева Н.В., к.т.н., доцент
доцент кафедры ХМ**

Согласовано с работодателями:

**Фидурова С.Н., заместитель начальника отдела
физико-химических исследований инженерно-
технического центра ООО «Газпром добыча
Астрахань»**

**Лукин Н.В., директор МБОУ г. Астрахани
«Лицей №2»**

Направление подготовки /
специальность

**04.05.01 ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И
ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ**

Направленность (профиль) ОПОП

Квалификация (степень)

Химик. Преподаватель химии

Форма обучения

очная

Год приема

2024

Курс

4

Семестр

7

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1. Целью освоения дисциплины «Вычислительные методы в химии» является знакомство студентов с теоретическими основами численных методов в химии.

1.2. Задачи освоения дисциплины «Вычислительные методы в химии»:

знакомство с важнейшими теоретическими идеями и их численными методами расчета, осваивает элементы автоматизации и компьютеризации в различных направлениях химической отрасли, в частности, применение аналитических процедур с целью улучшения ориентирования в лабораторно-практических задачах или проведение оптимизационных процедур.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП

2.1. Учебная дисциплина “Вычислительные методы в химии” относится к базовой части (Б1.Б.20) обязательных дисциплин. Дисциплина логически связана с высшей математикой и физикой. Дисциплина встраивается в структуру ОПОП как с точки зрения преемственности содержания, так и с точки зрения непрерывности процесса формирования компетенций выпускника. «Входные» знания, умения и опыт обучающегося, необходимые для при освоении дисциплины «Вычислительные методы в химии», приобретенные в результате освоения предшествующих дисциплин связаны со знанием теоретических основ высшей математики, физики, общей химии, квантовой механики и квантовой химии, а также практические навыки использования стандартных программ информатики.

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

- «Высшая 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.

«Аналитическая химия»

Знания: представлениями об основных химических законах, описывающих химическое равновесие;

Умения: составлять модельные схемы решения задач ступенчатой диссоциации в растворах; кинетики химических реакций; каталитических процессов;

Навыки: обработки и данных и интерпретации результатов, формирования выводов.

- «Квантовая механика и квантовая химия»

Знания: представления о математических операторах и постулатах, уравнение Шредингера в моделях водородоподобных атомов и многоэлектронных систем;

Умения: решать типовые модельные квантово-механические задачи, в частности, вычислять энергию системы приближенными методами;

Навыки: использования вычислительных схем прогноза реакционной способности молекул и оценки термодинамики и кинетики химических процессов.

- «Информатика»

Знания: представлениями об устройстве компьютера, функционировании системного и

прикладного программного обеспечения;

Умения: работать в программных комплексах по направлению подготовки;

Навыки: использования электронных баз данных, программных пакетов для обработки и построения корреляционных зависимостей.

2.3. Перечень последующих учебных дисциплин, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной:

- «Физическая химия» (практикум, решение задач, самостоятельная работа),
- «Коллоидная химия» (практикум, самостоятельная работа),
- «Физические методы исследования в химии»,
- «Метрология. Стандартизация и сертификация в химической экспертизе»,
- преддипломная практика.

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП ВО по данному направлению подготовки (специальности):

б) общепрофессиональных (ОПК):

ОПК-1 – Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности

ОПК-3 – Способность использовать теоретические основы фундаментальных разделов математики и физики в профессиональной деятельности.

Таблица 1. Декомпозиция результатов обучения

Код компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)		
		Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)
ОПК-1	ОПК-1.1 Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	теоретические основы численных методов решения СЛАУ и интегрально-дифференциальных уравнений, методов обработки экспериментальных данных в химических исследованиях	использовать математический аппарат, алгоритмы численного решения СЛАУ и интегрально-дифференциальных уравнений, корреляционных и регрессионных методов обработки экспериментальных данных	приемами, техникой численного решения интегрально-дифференциальных уравнений и СЛАУ, корреляционного и регрессионного методов обработки экспериментальных данных
	ОПК-1.2 Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов	ключевые программные пакеты, онлайн ресурсы для составления многопоточных задач	использовать математический аппарат и алгоритмы численного решения СЛАУ	приемами, техникой численного решения СЛАУ

Код компетенции	Код и наименование индикатора	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)		
		Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)
	химии			
	ОПК-1.3 Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	приемы обработки массива данных и интерпретации полученных результатов с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач	строить графические зависимости и модельные схемы для интерпретации полученных результатов. Применение прогностических схем при моделировании.	методикой сбора данных и способами дальнейшего представления результатов в виде графиков, 3D-поверхностей, диаграмм.
	ОПК-1.4 Владеет навыками проведения химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	основы корреляционных и регрессионных методов обработки данных.	работать с программными средствами и онлайн ресурсами для построения зависимостей и обработки данных.	базовыми умениями работы с вычислительными программами по обработке данных и построению корреляционных и регрессионных зависимостей.
ОПК-3	ОПК-3.1. Знает основные методы, способы и средства получения, хранения, обработки результатов научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий	Обрабатывает полученные результаты исследований с использованием стандартных методов и методик.	Применяет при обработке данных стандартное и оригинальное программное обеспечение.	Обрабатывает и представляет результаты лабораторных испытаний в соответствии с действующими технологическими регламентами.
	ОПК-3.2. Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	Систематизирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений	Анализирует результаты экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач
	ОПК-3.3. Умеет получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных	Предлагает подход для интерпретации результатов эксперимента	Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов	Предлагает интерпретацию результатов и расчетно-теоретических работ с использованием

Код компетенции	Код и наименование индикатора	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)		
		Знать (1)	Уметь (2)	Владеть (3)
	технологий			основ традиционных и новых разделов химии
	ОПК-3.4. Владеет методами регистрации и программным обеспечением для обработки результатов научного эксперимента	Знает основы сбора и регистрации данных, а также стандартные настройки для обработки данных	Умеет использовать стандартные настройки обработки результатов в специализированных программах	Владеет приемами работы в комплексах программ для обработки результатов научного эксперимента

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость дисциплины в соответствии с учебным планом составляет 3 зачетных единицы 108 часов), семестр – 7.

Трудоемкость отдельных видов учебной работы студентов очной формы обучения приведена в таблице 2.1.

Таблица 2.1. Трудоемкость отдельных видов учебной работы по формам обучения

Вид учебной и внеучебной работы	для очной формы обучения
Объем дисциплины в зачетных единицах	3
Объем дисциплины в академических часах	108
Контактная работа обучающихся с преподавателем (всего), в том числе (час.):	61
- занятия лекционного типа, в том числе:	24
- практическая подготовка (если предусмотрена)	-
- занятия семинарского типа (семинары, практические, <u>лабораторные</u>), в том числе:	36
- практическая подготовка (если предусмотрена)	-
- консультация (предэкзаменационная)	1
- промежуточная аттестация по дисциплине	-
Самостоятельная работа обучающихся (час.)	47
Форма промежуточной аттестации обучающегося (зачет/экзамен), семестр(ы)	экзамен - 7 семестр

Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий и самостоятельной работы, для каждой формы обучения представлено в таблице 2.2.

Таблица 2.2. Структура и содержание дисциплины (модуля)

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Контактная работа, час.							СР, час.	Итого часов	Форма текущего контроля успеваемости, форма промежуточной аттестации [по семестрам]
	Л		ПЗ		ЛР		КР / КП			
	Л	в т.ч ПП	ПЗ	в т.ч ПП	ЛР	в т.ч ПП				
Семестр 7.										
Вычислительные методы решения систем линейных и нелинейных алгебраических уравнений.	4				6			7	17	Опрос, решение задач для самоконтроля
Вычислительные методы одномерной и многомерной оптимизации.	4				4			6	14	Контрольная работа №1
Механическая, структурная, квантово-химическая модели молекул. Задачи на поиск собственного значения.	4				6			6	16	Опрос, решение задач для самоконтроля Контрольная работа №2
Математические модели и моделирование химических процессов для решения задач физической химии.	4				6			8	18	Опрос, решение задач (работа в мини-группах)
Методы математической статистики. Статистическая обработка экспериментальных данных для решения задач аналитической химии.	2				4			6	12	Решение задач, Контрольная работа №3
Метод наименьших квадратов. Интерполяция.	2				4			6	12	Решение тематических задач Контрольная работа №4
Реализация численных методов в прикладных программных комплексах.	4				6			8	18	Опрос, работа в мини-группах

Раздел, тема дисциплины (модуля)	Контактная работа, час.							СР, час.	Итого часов	Форма текущего контроля успеваемости, форма промежуточной аттестации <i>[по семестрам]</i>
	Л		ПЗ		ЛР		КР / КП			
	Л	в т.ч П П	П З	в т.ч П П	Л Р	в т.ч П П				
Консультации									1	
Контроль промежуточной аттестации									-	Экзамен
ИТОГО за семестр:	24				36			47	107	
Итого за весь период	24				36			47	108	

Примечание: Л – лекция; ПЗ – практическое занятие, семинар; ЛР – лабораторная работа; ПП – практическая подготовка; КР / КП – курсовая работа / курсовой проект; СР – самостоятельная работа

Таблица 3. Матрица соотнесения разделов, тем учебной дисциплины (модуля) и формируемых компетенций

Раздел, тема дисциплины	Кол-во часов	Код компетенции		Общее количество компетенций
		ОПК-1	ОПК-3	
7 семестр				
Вычислительные методы решения систем линейных и нелинейных алгебраических уравнений.	17	+	+	2
Вычислительные методы одномерной и многомерной оптимизации.	14	+	+	2
Механическая, структурная, квантово-химическая модели молекул. Задачи на поиск собственного значения.	16	+	+	2
Математические модели и моделирование химических процессов для решения задач физической химии.	18	+	+	2
Методы математической статистики. Статистическая обработка экспериментальных данных для решения задач аналитической химии.	12	+	+	2
Метод наименьших квадратов. Интерполяция.	12	+	+	2
Реализация численных методов в прикладных программных комплексах.	18	+	+	2
Итого	107			2

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

1. Элементы численных методов. Решение систем линейных алгебраических уравнений методом Гаусса с выбором главного элемента. Решение уравнений методом деления отрезка пополам и методом Ньютона (модификации). Применимость методов и скорость сходимости задач. Одномерная и многомерная оптимизация. Поиск минимума функции одного переменного. Поиск минимума и максимума функции многих переменных. Основные типы

рельефа функции: котловинный, овражный, нерегулярный, связь с задачами математического моделирования в химии. Методы золотого сечения и квадратичной интерполяции. Минимизация функции нескольких переменных: метод прямого поиска Хука-Дживса, метод скорейшего спуска, метод Ньютона. Частный случай минимизации суммы квадратов: Метод Гаусса-Ньютона. Программная реализация поиска минимума и максимума функции одной и нескольких переменных. Способы минимизации функционала, их приложение для решения задач квантовой химии.

2. Вычислительные методы решения квантово-механических задач и задач физической химии. Механическая, структурная, квантово-химическая модели молекул. Одномерные и многомерные задачи. Графическое представление радиальных и угловых частей водородоподобных орбиталей. Вариационный принцип квантовой механики. Задача о приближенных методах решения уравнения Шредингера. Представление молекулярных орбиталей в теории линейной комбинации атомных орбиталей. Пути химических реакций. Понятие переходного состояния системы. Математический вывод термодинамических параметров, их приложение для решения задач физической химии. Химические задачи, сводящиеся к решению нелинейных уравнений. Химические задачи, описываемые системами ЛАУ. Некоторые сведения о дифференциальных уравнениях химических процессов, уравнения кинетики. Математические модели химических процессов. Необратимые реакции первого порядка. Обратимые реакции первого порядка. Обратимые реакции n -порядков.

3. Вычислительные методы решения химико-аналитических задач. Источники и вид представления экспериментальных данных. Промехи. 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. Оценка параметров. Таблично заданные функции и их интерполяция. Точность и сходимость интерполяции. Приближенное вычисление определенных интегралов. Порядок точности. Формулы Ньютона-Котеса и Гаусса, формулы прямоугольников, трапеций, Симпсона. Оценка погрешности. Численное дифференцирование. Численное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений: решение задачи Коши. Устойчивость решения. Метод Эйлера.

4. Вычислительные методы и комплексы программ. Реализация численных методов в прикладных программных комплексах (OpenOffice.org Calc, SciDAVis, Mathcad Prime, Gamess PC и др.) и решение конкретных задач физической химии, аналитической химии, квантовой механики и квантовой химии с использованием вычислительных процедур.

5. ПЕРЕЧЕНЬ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ

5.1. Указания по организации и проведению лекционных и лабораторных занятий с перечнем учебно-методического обеспечения

При подготовке к лабораторным занятиям студентам отводится время на самостоятельную работу в объеме 47 часов, которая включает изучение лекционного курса, ознакомление с материалом, изложенным в учебниках и иных источниках информации, включая поисковую работу в интернете. Полезно использовать образовательный портал электронного образования Астраханского государственного университета (<http://moodle.asu.edu.ru/>) на котором периодически обновляется информация о текущих заданиях и присутствует необходимый материал по курсу учебной дисциплины и/или использовать для этих целей общий электронный адрес группы.

Ниже приводятся типовые тематические вопросы для лабораторных занятий, тестовые задания, задачи и вопросы для самоконтроля, над которыми целесообразно работать при изучении основного материала и типовой перечень вопросов к экзамену. На занятиях студенты закрепляют полученные знания теоретической части курса, который обучает постановке практико-ориентированных исследований как в области структурно-динамического исследования молекул, так и в области моделирования химических процессов взаимодействия, а также статистической обработки экспериментальных данных в аналитической части химии, корректному выбору вычислительных схем, алгоритмов и методов расчета. Необходимым условием успешного усвоения дисциплины является систематический текущий контроль знаний студентов в течение всего семестра, который осуществляется в форме мини-опросов по основным модулям курса, выполнения контрольных работ.

Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине «Вычислительные методы в химии»:

1. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. 7-е изд. – М.: БИНОМ, 2012. 635 с.
2. 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.
3. 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.
4. Золотарева Н.В. Численные методы анализа в химии: Учебно-методическое пособие. – Астрахань: Издатель: Сорокин Роман Васильевич, 2020. – 78 с;
5. 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>;

6. 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;

7. Федоров А.А., Методы химического анализа объектов природной среды [Электронный ресурс] /А. А. Федоров, Г. 3. 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>

5.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины

Таблица 4. Содержание самостоятельной работы обучающихся

Вопросы, выносимые на самостоятельное изучение	Кол-во часов	Формы работы
Вычислительные методы решения систем линейных и нелинейных алгебраических уравнений. Решение уравнений методом деления отрезка пополам и методом Ньютона (модификации). Применимость методов и скорость сходимости задач.	6	Опрос, решение задач для самоконтроля
Вычислительные методы одномерной и многомерной оптимизации. Методы золотого сечения и квадратичной интерполяции. Минимизация функции нескольких переменных: метод прямого поиска Хука-Дживса, метод скорейшего спуска, метод Ньютона. Частный случай минимизации суммы квадратов: Метод Гаусса-	6	Контрольная работа №1

Ньютона.		
Механическая, структурная, квантово-химическая модели молекул. Задачи на поиск собственного значения. Графическое представление радиальных и угловых частей водородоподобных орбиталей. Вариационный принцип квантовой механики. Задача о приближенных методах решения уравнения Шредингера.	6	Опрос, решение задач для самоконтроля Контрольная работа №2
Математические модели и моделирование химических процессов для решения задач физической химии. Математический вывод термодинамических параметров, их приложение для решения задач физической химии. Математические модели химических процессов. Необратимые реакции первого порядка. Обратимые реакции первого порядка. Обратимые реакции n -порядков.	6	Опрос, решение задач (работа в мини-группах)
Методы математической статистики. Статистическая обработка экспериментальных данных для решения задач аналитической химии. Кривая распределения результатов. Примеры расчетных схем в спектрофотометрическом, титриметрическом, гравиметрическом, потенциометрическом и других методах исследования.	6	Решение задач, Контрольная работа №3
Метод наименьших квадратов. Интерполяция. Численное дифференцирование. Численное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений: решение задачи Коши. Устойчивость решения. Метод Эйлера.	6	Решение тематических задач Контрольная работа №4
Реализация численных методов в прикладных программных комплексах. Реализация численных методов в прикладных программных комплексах OpenOffice.org Calc, SciDAVis, Mathcad Prime, Gamess PC, ChemCraft	7	Опрос, работа в мини-группах

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

Итог работы в минигруппах – подготовка отчета численного эксперимента. Ответ оформляется в электронном виде в формате *.xlsx, в формате *.docx. Выравнивание текста по ширине. Шрифт Times New Roman. Размер 12. Параметры страницы соответствуют: верхнее 2см, нижнее 2см, левое 2см, правое 2см. Студенты отчитываются индивидуально по выполненной работе (типовые вопросы могут содержать темы из самостоятельной проработки).

Образец отчета

1. Визуализировать и сохранить оптимизированную 3d-молекулу в word-документе в декартовой и сферической системе координатах, также включить картинку для отчёта.
2. Подготовить входной файл для вычисления. Выполнить расчет, указанным методом в вычислительном практикуме. Для выполнения расчетов могут быть использована программа бесплатного распространения в академических целях MOPAC (<http://openmopac.net/>). Структуру входного и выходного файла в программе MOPAC можно посмотреть на сайте (<http://openmopac.net/Manual/index.html>) в разделе «теория», «геометрия» и «примеры». Ключевые команды и описание представлено в разделе «keywords».
3. Для визуализации молекул можно использовать любую программу, имеющую бесплатное распространение в академических целях: Blender (<https://www.blender.org/>) MaSK (<http://ccmsi.us/mask/>); Jmol (<https://sourceforge.net/projects/jmol/>).

4. Составить таблицу следующих данных: длины связей, валентных углов, торсионных углов; кол-во связывающих МО, энергии граничных молекулярных орбиталей, величина энергетической щели; общая энергия, теплота образования, потенциал ионизации; объем и площадь сферы. Выписать величину электростатического дипольного момента молекулы, таблицу с зарядами атомов (в а.е. заряда) по Малликену и/или по Лёвдину, величину среднеквадратичного градиента (RMS Gradient). Добавить график зависимости «RMS Grad (или Energy) от количества шагов оптимизации (n)» для равновесной (минимизированной) структуры соединения.
5. Сопоставить результаты расчетов с экспериментальными или справочными данными. Указать наилучшую сходимость полученных данных с результатами эксперимента.

Студенты отчитываются индивидуально по выполненной работе (типовые вопросы могут содержать темы из самостоятельной проработки).

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Возможно применение электронного обучения и дистанционных образовательных технологий. В соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки реализация компетентностного подхода должна предусматривать широкое использование в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий (компьютерных симуляций, деловых и ролевых игр, разбор конкретных ситуаций, психологические и иные тренинги, диспуты, дебаты, портфолио круглые столы и пр.) в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития требуемых компетенций обучающихся. В рамках учебных курсов должны быть предусмотрены встречи с представителями российских и зарубежных компаний, государственных и общественных организаций, мастер-классы экспертов и специалистов.

6.1. Образовательные технологии

С целью формирования и развития профессиональных навыков у обучающихся в учебном процессе по данной учебной дисциплине предусматривается использование интерактивных занятий;

- организация вычислительного (компьютерного) эксперимента;
- презентации с обучающими видеороликами (русский язык, английский язык);
- организация самостоятельной работы студентов, включая подготовку к коллоквиуму с применением Internet-ресурсов и программных комплексов;
- проведение контрольных работ.

Для организации самостоятельной работы студентов по курсу «Вычислительные методы в химии» используются современные информационные технологии – комплекс учебных и учебно-методических материалов, в частности, программы, методические указания к лабораторным занятиям, информационные ресурсы в виде программных приложений, примеры заданий к зачету, список рекомендуемой литературы, размещенные в свободном сетевом доступе. Большой объем самостоятельной работы требует ее организации, структурирования и тщательного контроля, для этого используются современные web- и e-mail ориентированные технологии. Студенты получают индивидуальное задание для самостоятельного выполнения на каждом лабораторном 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.

На лабораторных занятиях студенты закрепляют полученные знания теоретической части курса, который обучает постановке практико-ориентированных исследований, как в области квантовых расчетов – исследования молекул, моделирования химических процессов их

взаимодействия, корректному выбору вычислительных схем, алгоритмов и методов квантовой механики, а также в области математической статистики - выбору статистических методов обработки экспериментальных данных. Необходимым условием успешного усвоения дисциплины является систематический текущий контроль знаний студентов в течение всего семестра, который осуществляется в форме мини-опросов, коллоквиумов по основным модулям курса, выполнения контрольных работ.

Таблица 5. Образовательные технологии, используемые при реализации учебных занятий

Раздел, тема дисциплины	Форма учебного занятия		
	Лекция	Практическое занятие, семинар	Лабораторная работа
Раздел I. Элементы численных методов			
<i>Тема 1.</i> Решение систем линейных алгебраических уравнений: точные и итерационные методы	Вводная лекция	Не предусмотрено	Выполнение задания на ПК
<i>Тема 2.</i> Одномерная и многомерная оптимизация. Поиск минимума функции одного переменного.	Лекция	Не предусмотрено	Выполнение задания на ПК
Раздел II. Численные методы решения квантово-механических задач и задач физической химии			
<i>Тема 1.</i> Одномерные и многомерные задачи.	Лекция	Не предусмотрено	Выполнение задания на ПК
<i>Тема 2.</i> Химические задачи, сводящиеся к решению нелинейных уравнений.	Лекция-диалог	Не предусмотрено	Выполнение задания на ПК
Раздел III. Численные методы решения химико-аналитических задач			
<i>Тема 1.</i> Примеры расчетных схем в спектрофотометрическом, титриметрическом, гравиметрическом, потенциометрическом и других методах исследования.	Лекция-диалог	Не предусмотрено	Выполнение задания на ПК
<i>Тема 2.</i> Численное дифференцирование и интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений: решение задачи Коши.	Лекция	Не предусмотрено	Выполнение задания на ПК
Раздел IV. Численные методы и комплексы программ			
<i>Тема 1.</i> Реализация численных методов в прикладных программных комплексах	Лекция	Не предусмотрено	Выполнение задания на ПК

6.2. Информационные технологии

Информационные технологии, используемые при реализации различных видов учебной и внеучебной работы:

- 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);
- 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.

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

6.3.1. Программное обеспечение

Microsoft Office 2013	Пакет офисных программ
Платформа дистанционного обучения LMS Moodle	Виртуальная обучающая среда
Google Chrome	Браузер
Notepad++	Текстовый редактор
Scilab	Пакет прикладных математических программ
MathCad 14	Система компьютерной алгебры из класса систем автоматизированного проектирования, ориентированная на подготовку интерактивных документов с вычислениями и визуальным сопровождением Система автоматизации деятельности на предприятии

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. Единое окно доступа к образовательным ресурсам <http://window.edu.ru>

6. Министерство науки и высшего образования Российской Федерации <https://minobrnauki.gov.ru>

7. Министерство просвещения Российской Федерации <https://edu.gov.ru>

8. Информационно-аналитический портал государственной программы Российской Федерации «Доступная среда» <http://zhit-vmeste.ru>

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

7.1. Паспорт фонда оценочных средств

При проведении текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине «Вычислительные методы в 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 (модуля), результатов обучения по дисциплине (модулю) и оценочных средств

Контролируемый раздел, тема дисциплины (модуля)	Код контролируемой компетенции	Наименование оценочного средства
Вычислительные методы решения систем линейных и нелинейных алгебраических уравнений.	ОПК-3, ОПК-4	Опрос, решение задач для самоконтроля
Вычислительные методы одномерной и многомерной оптимизации.	ОПК-3, ОПК-4	Контрольная работа №1
Механическая, структурная, квантово-химическая модели молекул. Задачи на поиск собственного значения.	ОПК-3, ОПК-4	Опрос, решение задач для самоконтроля Контрольная работа №2
Математические модели и моделирование химических процессов для решения задач физической химии.	ОПК-3, ОПК-4	Опрос, решение задач (работа в мини-группах)
Методы математической статистики. Статистическая обработка экспериментальных данных для решения задач аналитической химии.	ОПК-3, ОПК-4	Решение задач, Контрольная работа №3
Метод наименьших квадратов. Интерполяция.	ОПК-3, ОПК-4	Решение тематических задач Контрольная работа №4
Реализация численных методов в прикладных программных комплексах.	ОПК-3, ОПК-4	Опрос, работа в мини-группах

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

В таблицах 7–8 приводятся показатели и критерии оценивания компетенций, шкалы 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, не способен применить знание теоретического материала при выполнении заданий, испытывает затруднения и допускает ошибки при выполнении заданий, выполняет задание при подсказке преподавателя, затрудняется в формулировке выводов.
2 «неудовлетворительно»	не способен правильно выполнить задание.

7.3. Контрольные задания и иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения по дисциплине (модулю)

Ниже приводятся типовые тематические вопросы для лабораторных занятий, тестовые задания, задачи и вопросы для самоконтроля, темы проблемных задач для подготовки к числительным экспериментам, над которыми целесообразно работать при изучении основного материала, также приведен перечень вопросов к экзамену.

Тема 1. Численные методы решения систем линейных и нелинейных алгебраических уравнений

1. Подготовка презентаций и ключевые темы к семинару «Численные методы решения систем линейных и нелинейных алгебраических уравнений»

1. Основные определения и обозначения. Матрицы.
2. Метод исключения Гаусса. Блок-схема.
3. Особенности реализации метода Гаусса на ЭВМ.
4. Метод квадратного корня. Алгоритм.
5. Метод простой итерации. Алгоритм.
6. Метод Зейделя. Алгоритм.
7. Метод Крамера. Алгоритм.
8. Метод Ньютона-Рафсона: описание.
9. Применимость методов и скорость сходимости задач.
10. Методы контроля сходимости итерационных методов решения систем.

2. Примеры типовых заданий для самоподготовки

1. Методом Жордана-Гаусса и правилом Крамера найти общее решение системы:

$$A = \begin{cases} 2x_1 + 4x_2 + 4x_3 + 6x_4 = 16 \\ 4x_1 + 2x_2 + 5x_3 + 7x_4 = 30 \\ 3x_1 + 2x_2 + 8x_3 + 5x_4 = 20 \\ 2x_1 + 8x_2 + 7x_3 + 3x_4 = -8 \end{cases}$$

2. Решить систему методом Зейделя:

$$\begin{cases} 2x + y + z = 5 \\ 3x + 4y - 2z = 3 \\ -4x + 2y + 6z = 10 \end{cases}$$

3. Решить систему методом квадратного корня:

$$\text{а) } \begin{cases} 2x_1 + 5x_2 = 5 \\ 5x_1 + 14x_2 = 14 \end{cases}$$

$$\text{б) } \begin{cases} 2,448x_1 + 3x_2 = 9,668 \\ 3x_1 + 8,224x_2 = 21,962 \end{cases}$$

$$\text{в) } \begin{cases} 4,4x_1 - 3x_2 = 5,8 \\ -3x_1 + 9,6x_2 = 3,6 \end{cases}$$

$$\text{г) } \begin{cases} 3x_1 + 2x_2 = 1,999 \\ 2x_1 + 16x_2 = 8,666 \end{cases}$$

4. Методом Жордана-Гаусса найти общее решение системы:

$$\text{а) } A = \begin{cases} 2x_1 + 4x_2 + 4x_3 = 8 \\ 4x_1 + 2x_2 + 5x_3 = 7 \\ 3x_1 + 2x_2 + 8x_3 = 10 \end{cases}$$

$$\text{б) } A = \begin{cases} x_1 - 2x_2 + 3x_3 = 4 \\ 2x_1 + 3x_2 - 4x_3 = -2 \\ 3x_1 - 2x_2 - 5x_3 = -2 \end{cases}$$

$$\text{в) } A = \begin{cases} x_1 + x_2 - x_3 = 3 \\ x_1 + x_2 + x_3 = 3 \\ x_1 + 2x_2 + x_3 = 5 \end{cases}$$

$$\text{г) } A = \begin{cases} 2x_1 + 5x_2 - 4x_3 = 9 \\ 3x_1 + 15x_2 - 9x_3 = 21 \\ 5x_1 + 5x_2 - 7x_3 = 15 \end{cases}$$

5. Решить систему методом простой итерации:

$$\text{а) } \begin{cases} 6x + 2y - 3z = 10 \\ 2x - 5y + z = -8 \\ 3x + 2y + 6z = 7 \end{cases}$$

$$\text{б) } \begin{cases} 2x_1 + 5x_2 - x_3 = -4 \\ 10x_1 + 2x_2 - 2x_3 = -8 \\ -x_1 - 2x_2 + 6x_3 = 24 \end{cases}$$

$$\text{в) } \begin{cases} 6x_1 - 2x_2 - x_3 = 7 \\ 3x_1 + 5x_2 - x_3 = 15 \\ x_1 + x_2 + 7x_3 = 11 \end{cases}$$

$$\text{г) } \begin{cases} 5x_1 + 2x_2 - 3x_3 = 4 \\ 2x_1 - 7x_2 + 2x_3 = 8 \\ 6x_1 + 3x_2 + 8x_3 = 28 \end{cases}$$

6. Решить систему методом Зейделя:

$$\text{а) } \begin{cases} 6x_1 - 2x_2 - x_3 = -1 \\ 2x_1 + 5x_2 - 3x_3 = 3 \\ 4x_1 + 2x_2 - 7x_3 = -13 \end{cases}$$

$$\text{б) } \begin{cases} x_1 + 3x_2 - 2x_3 = -3 \\ 2x_1 + x_2 + x_3 = 4 \\ 4x_1 + 2x_2 + 8x_3 = 26 \end{cases}$$

$$\text{в) } \begin{cases} 2x + y + z = 5 \\ 3x + 4y - 2z = 3 \\ -4x + 2y + 6z = 10 \end{cases}$$

$$\text{г) } \begin{cases} x_1 + 4x_2 - x_3 = 8 \\ 12x_1 - 3x_2 + x_3 = 7 \\ 7x_1 - x_2 + 12x_3 = 17 \end{cases}$$

7. Решить систему методом Крамера:

$$\text{а) } A = \begin{cases} 2x_1 + 4x_2 + 4x_3 + 6x_4 = 16 \\ 4x_1 + 2x_2 + 5x_3 + 7x_4 = 30 \\ 3x_1 + 2x_2 + 8x_3 + 5x_4 = 20 \\ 2x_1 + 8x_2 + 7x_3 + 3x_4 = -8 \end{cases}$$

$$\text{б) } A = \begin{cases} x_1 + 2x_2 + 3x_3 + 4x_4 = -3 \\ 5x_1 + 10x_2 + 16x_3 + 19x_4 = -2 \\ 7x_1 + 14x_2 + 20x_3 + 27x_4 = 0 \\ 3x_1 + 5x_2 + 6x_3 + 13x_4 = 5 \end{cases}$$

$$\text{в) } A = \begin{cases} 2x_1 + 5x_2 - 4x_3 = 8 \\ 3x_1 + 15x_2 - 9x_3 = 5 \\ 5x_1 + 5x_2 - 7x_3 = 27 \end{cases}$$

$$\text{г) } A = \begin{cases} 7x_1 - 3x_2 + 5x_3 = 32 \\ 5x_1 + 2x_2 + x_3 = 11 \\ 2x_1 - x_2 + 3x_3 = 14 \end{cases}$$

Тема 2. Численные методы одномерной и многомерной оптимизации

1. Подготовка презентаций и ключевые темы к семинару «Численные методы одномерной и многомерной оптимизации»

1. Метод золотого сечения. Алгоритм.
2. Метод прямого поиска Хука-Дживса. Алгоритм.
3. Метод наискорейшего спуска. Алгоритм.
4. Метод Ньютона (Гаусса-Ньютона). Алгоритм.
5. Метод Монте-Карло. Алгоритм.

2. Примеры типовых заданий для самоподготовки

1. Методом золотого сечения локализуите точку экстремума в интервале r [1, 3], для функции

$$\text{вида } Q(r) = \frac{2}{3\sqrt{3}} \cdot e^{-\frac{r}{3a_0}} \cdot \left(1 - \frac{2 \cdot r}{3 \cdot a_0} + \frac{2 \cdot r^2}{27 \cdot (a_0)^2} \right) \text{ где } a_0 - \text{радиус боровской орбиты } 0,529\text{\AA}.$$

2. Рассчитайте энергию $2p_z$ -электрона $\psi = \frac{\sqrt{Z^3}}{4\sqrt{2}\pi a_0^3} \cdot \frac{Zr}{a_0} \cdot e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \cdot \cos \theta$ водородоподобного иона.
3. Методом деления отрезка пополам установите экстремум в интервале r [0, 4], где a_0 – радиус Боровской орбиты $0,529\text{\AA}$

$$Q(r) = \frac{e^{-\frac{r}{a_0}} \cdot \left(1 - \frac{r}{2 \cdot a_0} \right)}{\sqrt{2}}.$$

4. Методами Ньютона (хорд и секущих) найдите корень уравнения $4 \cos x + 0,3x = 0$, $[-10; -9]$, $\varepsilon = 10^{-3}$. Установите, какой метод обладает высокой скоростью сходимости результатов, за начальную точку примите одинаковое значение.
5. Найдите корень уравнения $3 \sin 8x - 0,7x + 0,9 = 0$, $[0,5; 1]$, с заданной точностью $\varepsilon = 2 \cdot 10^{-3}$ методом половинного деления.
6. Рассчитайте энергетические дескрипторы (в кДж/моль) трехъядерной системы, если известны кулоновские и резонансные интегралы:

$$\begin{pmatrix} -14 & -3 & -2 \\ -3 & -12 & -3 \\ -2 & -3 & -14 \end{pmatrix}$$

Постройте графическую зависимость « $|\psi|^2 - r$ » и сформулируйте выводы о распределении электронной плотности в системе. Можно ли на основании результатов сделать выводы о составе, строение и реакционной способности молекулы.

7. Рассчитайте энергетические дескрипторы (в кДж/моль) трехъядерной системы, если известны кулоновские и резонансные интегралы:

$$\begin{pmatrix} -0.5 & -1 & -2 \\ -1 & -4 & -1 \\ -2 & -1 & -0.5 \end{pmatrix},$$

коэффициент межъядерного перекрытия $S_{12} = S_{21}$ составляет 20%, тогда как коэффициент межъядерного перекрытия $S_{23} = S_{32}$ составляет 16%, а $S_{13} = S_{31}$ составляет 0%.

8. Рассчитайте собственные значения поверхности потенциальной энергии, если известно функция вида $f(x, y) = 4x^2 + 2x^2y + y^2 - xy + x - 0,5y + 3$, результаты визуализируйте в программе MathCAD.

9. Для непрерывной случайной величины, заданной функцией плотности вероятности

$$f(x) = \frac{e^{1-x^2}}{e-1} \text{ на отрезке } [a, b] \text{ дисперсия } D[x] \text{ находится по формуле: } D[x] = \int_a^b x^2 \cdot f(x) dx.$$

Рассчитайте эту величину для случая $a=-0,5$, $b=1,5$ с точностью до 6 значащих цифр.

10. С помощью симплекс-метода требуется решить задачу:

$$\begin{cases} x_1 - x_4 + x_5 = 2 \\ x_2 + 2x_4 + 3x_5 = 7 \\ x_3 + x_4 - 2x_5 = 1 \\ f = x_4 + 2x_5 = 3 - \rightarrow \min \end{cases}$$

11. Зависимость теплоемкости метана от температуры описывается уравнением $C_p = a + bT + cT^2 + d \lg T$, найдя значение констант a, b, c, d вычислите теплоемкость метана при температурах 250 °С и 450 °С (с точностью до 6 значащих цифр), если известно:

T, К	400	600	700	900
C_p , Дж/(моль·К)	40,74	52,53	58,05	67,27

Определите температуру, при которой теплоемкость метана составит 60,1 Дж/(моль·К).

3. Комплект заданий к контрольной работе

Вариант 1

- Приведите примеры построения аналитических и имитационных моделей.
- Найдите корень уравнения $(0,2x)^3 - \cos x = 0$, принадлежащий интервалу $[-4,5; -3,5]$, с заданной точностью $\varepsilon = 7 \cdot 10^{-4}$ методом половинного деления.
- Методом Ньютона (касательных и секущих) найдите корень уравнения $x \sin x - 1 = 0$, $[2; 3]$, $\varepsilon = 10^{-5}$. Установите, какой метод обладает высокой скоростью сходимости результатов, за начальную точку примите одинаковое значение.

Вариант 2

- Приведите примеры построения вещественных и идеальных моделей.
- Найдите корень уравнения $\sin x - x^2 + 3 = 0$, принадлежащий интервалу $[-2; -1]$, с заданной точностью $\varepsilon = 2 \cdot 10^{-4}$ методом простой итерации.
- Методами Ньютона (хорд и секущих) найдите корень уравнения $10 \cos x - 0,1x^2 = 0$, $[-2; -1]$, $\varepsilon = 10^{-5}$. Установите, какой метод обладает высокой скоростью сходимости результатов, за начальную точку примите одинаковое значение.

Вариант 3

- Приведите примеры непрерывных и дискретных моделей.
- Найдите корень уравнения $\ln x + 0,5x - 2 = 0$, принадлежащий интервалу $[2; 3]$, с заданной точностью $\varepsilon = 2 \cdot 10^{-4}$ методом простой итерации.
- Методами Ньютона (касательных, секущих, хорд) найдите корень уравнения $(0,2x)^3 - \cos x = 0$, $[-2; -1]$, $\varepsilon = 10^{-5}$. Установите, какой метод обладает высокой скоростью сходимости результатов, за начальную точку примите одинаковое значение.

Вариант 4

- Детерминированные и стохастические виды моделей.
- Найдите корень уравнения $\ln x + 0,5x - 2 = 0$, принадлежащий интервалу $[2; 3]$, с заданной точностью $\varepsilon = 2 \cdot 10^{-4}$ методом простой итерации.
- Методами Ньютона (касательных, секущих, хорд) найдите корень уравнения $(0,2x)^3 - \cos x = 0$, $[-2; -1]$, $\varepsilon = 10^{-5}$. Установите, какой метод обладает высокой скоростью сходимости результатов, за начальную точку примите одинаковое значение.

Тема 3. Механическая, структурная, квантово-химическая модели молекул. Задачи на поиск собственного значения

1. Подготовка презентаций и ключевые темы к семинару «Численные методы решения квантово-механических задач»

- Квантово-химическая, механическая и структурная модели молекул.
- Одномерные и многомерные задачи поиска минимума энергии молекул.

- Графические представления радиальных, угловых частей водородоподобных орбиталей и поверхностей потенциальной энергии молекул.
- Вариационный подход в квантовой механике
- Задача о приближенных методах решения уравнения Шредингера.
- Представление молекулярных орбиталей в теории линейной комбинации атомных орбиталей.
- Пути химических реакций. Понятие переходного состояния системы.
- Математический вывод термодинамических параметров, их приложение для решения задач физической химии.
- Химические задачи, сводящиеся к решению нелинейных уравнений.
- Химические задачи, описываемые системами ЛАУ.
- Некоторые сведения о дифференциальных уравнениях химических процессов, уравнения кинетики.
- Математические модели химических процессов.
- Необратимые реакции первого порядка.
- Обратимые реакции первого порядка и реакции n -порядков.

2. Примеры типовых заданий для самоподготовки

- Рассчитайте собственные значения поверхности потенциальной энергии, если известно функция вида $f(x, y) = 4x^2 + 2x^2y + y^2 - xy + x - 0,5y + 3$, результаты визуализируйте в программе SciDavis.

- Для непрерывной случайной величины, заданной функцией плотности вероятности $f(x) = \frac{e^{1-x^2}}{e-1}$ на отрезке $[a, b]$ дисперсия $D[x]$ находится по формуле: $D[x] = \int_a^b x^2 \cdot f(x) dx$.

Рассчитайте эту величину для случая $a=-0,5$, $b=1,5$ с точностью до 6 значащих цифр.

- С помощью симплекс-метода требуется решить задачу:

$$\begin{cases} x_1 - x_4 + x_5 = 2 \\ x_2 + 2x_4 + 3x_5 = 7 \\ x_3 + x_4 - 2x_5 = 1 \\ f = x_4 + 2x_5 = 3 - - > \min \end{cases}$$

- Зависимость теплоемкости метана от температуры описывается уравнением $C_p = a + bT + cT^2 + d \lg T$, найдя значение констант a, b, c, d вычислите теплоемкость метана при температурах 250 °C и 450 °C (с точностью до 6 значащих цифр), если известно:

T, K	400	600	700	900
C_p , Дж/(моль·К)	40,74	52,53	58,05	67,27

Определите температуру, при которой теплоемкость метана составит 60,1 Дж/(моль·К).

Тема 4. Математические модели и моделирование химических процессов для решения задач физической химии

1. Темы для обсуждения в мини-группах (дискуссии)

- Математические модели химических процессов.
- Квантово-химические модели химических процессов.
- Термодинамические модели химических процессов.
- Статистические модели химических процессов.
- Кинетические модели химических процессов.
- Компьютерная реализация моделей.

Тема 5. Методы математической статистики. Статистическая обработка экспериментальных данных для решения задач аналитической химии.

Тема 6. Метод наименьших квадратов. Интерполяция

1. Примеры типовых заданий для самоподготовки

1. При адсорбции ионов никеля из водного раствора 10^{-4} активным углем были получены следующие данные:

Ni^{+2} , мл	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,9	1
$A_{\text{до}}$	0,046	0,108	0,204	0,32	0,403	0,506	0,576	0,589	0,630	0,682
$A_{\text{после}}$	0,023	0,012	0,149	0,223	0,315	0,325	0,429	0,500	0,606	0,66

Постройте график зависимости оптическая плотность – содержание ионов никеля в растворе и обработайте методом наименьших квадратов.

2. При адсорбции ионов никеля из водного раствора 10^{-4} активным углем были получены следующие данные:

Co^{+2} , мл	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,9	1
$A_{\text{до}}$	0,076	0,176	0,295	0,4	0,48	0,58	0,67	0,75	0,852	0,922
$A_{\text{после}}$	0,044	0,122	0,177	0,164	0,168	0,217	0,218	0,199	0,253	0,179

Постройте график зависимости оптическая плотность – содержание ионов никеля в растворе и обработайте методом наименьших квадратов.

3. При изучении содержания оксида кальция (масс. доля) в пробе гравиметрическим методом были получены следующие результаты: 0,15; 0,16; 0,17; 0,11; 0,11; 0,11; 0,12; 0,11; 0,11; 0,12; 0,15; 0,15; 0,12; 0,19; 0,12; 0,11; 0,15; 0,12; 0,17; 0,15. Проведите статистическую обработку данных.
4. При изучении содержания в пробе метионина (мл) титриметрическим методом были получены следующие результаты: 13,4; 16,8; 12,2; 18,1; 16,5; 16,1; 12,9; 16,4; 12,5; 12,4; 15,7; 16,2; 16,7; 18,9; 12,9; 13,0; 15,2; 15,5; 17,0; 15,9. Проведите статистическую обработку данных.
5. При изучении содержания марганца (%) в руде были получены следующие результаты: 1,5; 1,6; 1,4; 1,3; 1,1; 1,4; 1,2; 1,1; 1,1; 1,2; 1,5; 1,5; 1,2; 1,9; 1,2; 1,1; 1,5; 1,4; 1,9; 1,7. Проведите статистическую обработку данных.
6. Обработайте результаты лабораторного исследования методом наименьших квадратов.
- | | | | | | | | | | |
|---|---|------|------|------|------|------|------|------|------|
| x | = | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 |
| y | = | 0,95 | 0,88 | 0,81 | 0,75 | 0,71 | 0,67 | 0,63 | 0,60 |
7. При анализе железной руды были найдены следующие значения (% Fe_2O_3): 23,11; 24,90; 22,62; 23,14; 24,45%. Определите величину доверительного интервала при $P=0,95$.
8. Для десяти определений марганца в усредненной пробе надо найти стандартное отклонение. Получены следующие значения (в %, Mn):
- | | | | | | | | | | |
|------|------|------|------|------|------|------|------|------|-------|
| 0,69 | 0,70 | 0,67 | 0,66 | 0,67 | 0,68 | 0,67 | 0,69 | 0,68 | 0,68. |
|------|------|------|------|------|------|------|------|------|-------|

2. Комплект заданий к контрольной работе

Вариант 1

1. При изучении содержания оксида кремния (%) в пробе гравиметрическим методом были получены следующие результаты: 15; 16; 17; 11; 11; 11; 12; 11; 11; 12; 15; 15; 12; 19; 12; 11; 15; 12; 17; 15. Проведите статистическую обработку данных.
2. Обработайте результаты лабораторного исследования методом наименьших квадратов.

x	=	0,1	0,2	0,4	0,6	0,8	1	1,2	1,4
y	=	0,95	0,88	0,81	0,75	0,71	0,67	0,63	0,60

При анализе руды были найдены следующие значения (% Fe_3O_4): 13,14; 14,50; 20,20; 31,14; 14,08; 12,87%. Определите величину доверительного интервала при $P=0,95$.

Вариант 2

1. При изучении содержания оксида кальция (мол. доля) в пробе гравиметрическим методом были получены следующие результаты: 4,5; 4,6; 4,7; 4,1; 4,1; 4,1; 4,2; 4,1; 4,1; 4,2; 4,5; 4,5; 4,2; 4,9; 4,2; 4,1; 4,5; 4,2; 4,7; 4,5. Проведите статистическую обработку данных.
2. При адсорбции ионов меди (II) из водного раствора 10^{-4} активным углем были получены следующие данные:

Cu^{+2} , мл	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,9	1
$A_{\text{до}}$	0,026	0,780	0,194	0,302	0,38	0,498	0,589	0,702	0,990	0,970
$A_{\text{после}}$	0,003	0,012	0,149	0,183	0,198	0,250	0,329	0,341	0,470	0,470

Постройте график зависимости оптическая плотность – содержание ионов меди в растворе и обработайте методом наименьших квадратов.

Тема 7. Реализация численных методов в прикладных программных комплексах

1. Вычислительный практикум для работы на ПК

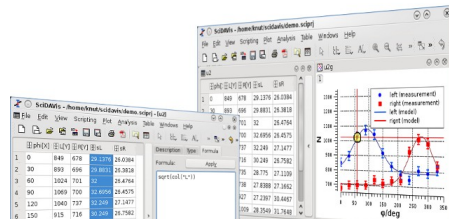
Построение 3D-поверхностей в SciDAVis



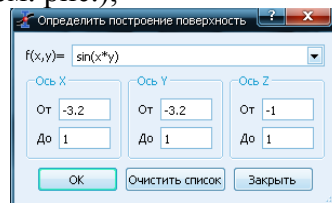
What is SciDAVis?

SciDAVis is a free application for Scientific Data Analysis and Visualization.

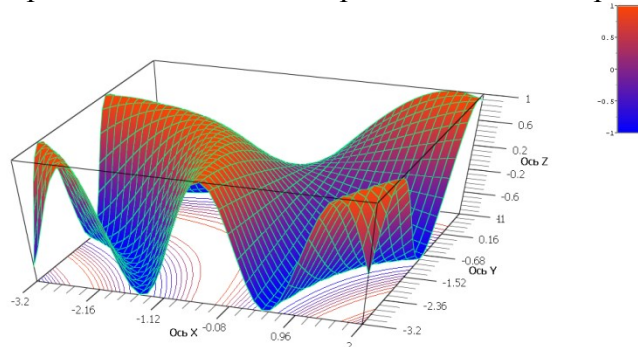
What does it look like?



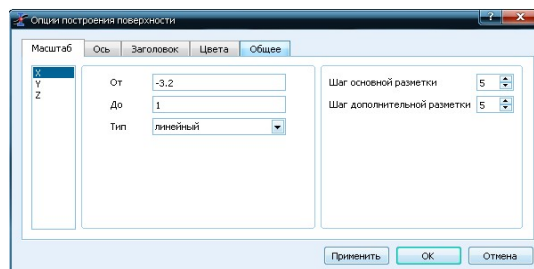
1. Открыть меню **Файл** и выбрать команду **Новый** → **Новый график 3D поверхности**;
2. В открывшемся диалоговом окне задать вид функции $f(x, y)$ и границы построения поверхности по осям ox , oy , oz (см. рис.);



3. Нажать **ОК**. Откроется рабочая область с изображенной 3D-поверхностью (см. рис.);

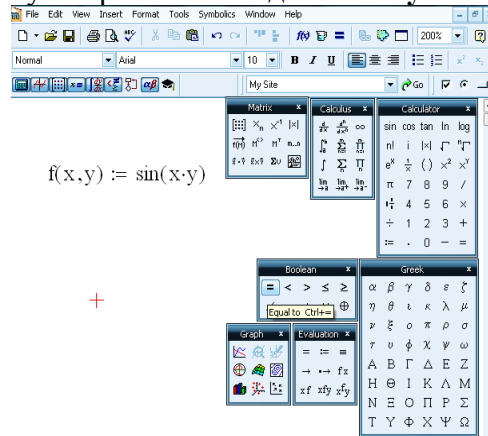


4. Построенную трехмерную поверхность можно вращать, приближать, удалять, копировать, изменять параметры, управляя колесиком и левой кнопкой мыши;
5. Вид поверхности можно менять, используя панель инструментов **3D-поверхность**;
6. Изменить масштаб, диапазон построения поверхности, подписи осей, цвет и другие параметры можно с помощью двойного щелчка мыши по рисунку. Появится диалоговое окно (см. рис.).



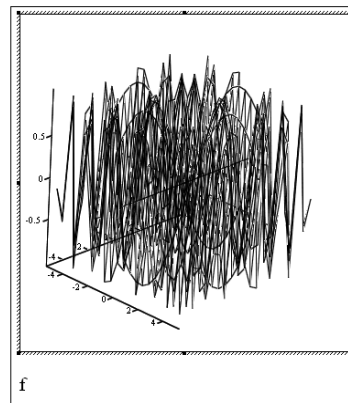
Построение 3D-поверхностей в Mathcad

1. В открывшемся окне создать формулу, используя панель инструментов – калькулятор для введения параметров, открыть меню **Вид (View)**, выбрать команду **Панель инструментов (Toolbars)**, поставить галочку напротив команды **Калькулятор (Calculator)** (см. рис.);

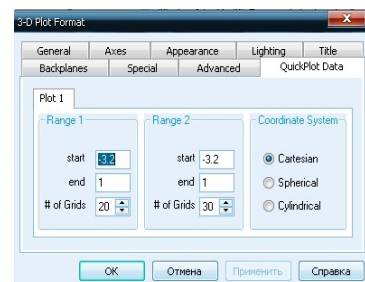
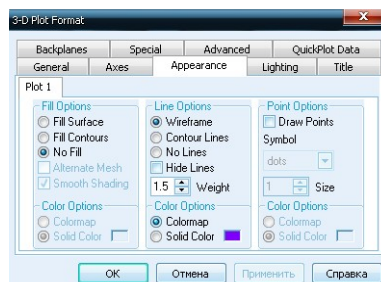


2. Открыть меню **Вставка (Insert)** и выбрать команду **График (Graph) → График поверхности (Surface plot)** (см. рис.);

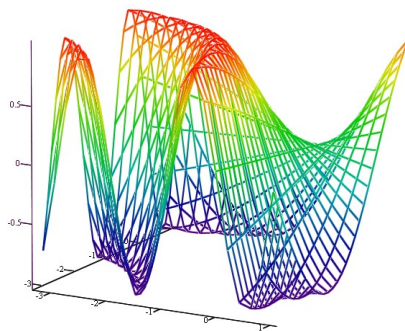
$$f(x, y) := \sin(x \cdot y)$$



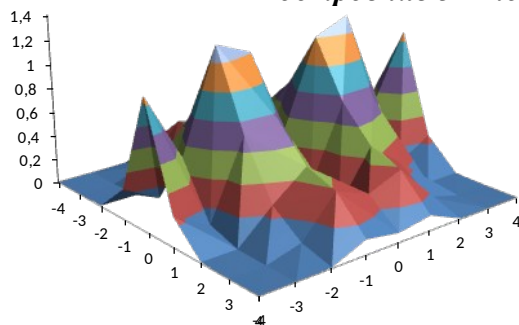
3. Построенную трехмерную поверхность можно вращать, приближать, удалять, копировать, изменять параметры, управляя колесиком и левой кнопкой мыши;
4. Изменить масштаб, диапазон построения поверхности, подписи осей, цвет и другие параметры можно с помощью двойного щелчка мыши по рисунку. Появится диалоговое окно (см. рис.).



5. В результате, можно получить 3D-поверхность (см. рис.).



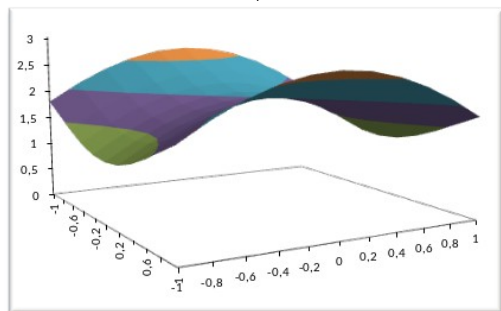
Построение 3D-поверхностей в Microsoft Office Excel



$$f(x, y) = (a * (\sin(x)^2) + b * (\cos(y)^2)) * \exp\left(-c * \left(\frac{x * y}{4}\right)^2 - d * \left(\frac{y}{4}\right)^2\right)$$

Диапазон: [-1; 1] с шагом 0,2

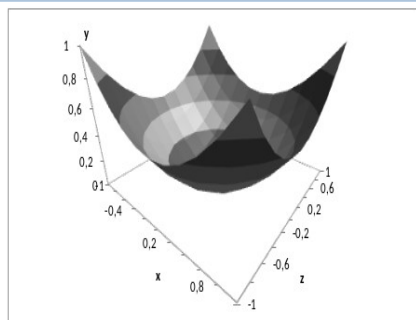
a	b	c	d
1	0,5	1	1



$$f(x, y) = \frac{\frac{\sin(x)^2}{(a)^2} + \cos(y)^2}{(b)^2 - c}$$

Диапазон: [-1; 1] с шагом 0,2

a	b	c
1	1	0



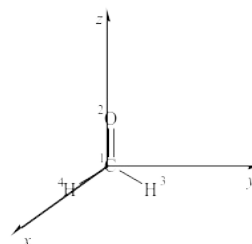
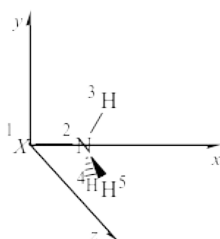
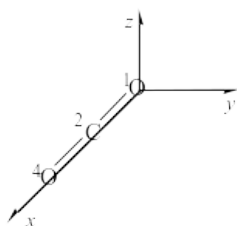
$$f(x, y) = \frac{\frac{(x)^2}{(a)^2} + \frac{(y)^2}{(b)^2} + (d)}{c}$$

Диапазоны: [-1; 1] с шагом 0,2

a	b	c	d
1	1	2	0

Векторная алгебра в применении к химическим задачам

1. Вычислите величины декартовых координат следующих молекул:



где X-псевдоатом задается только для определения симметрии, принять расстояние X-A 1.00Å, валентный угол HNH составляет 107°3', HCO 120°

2. Вычислите величины декартовых координат следующих молекул и определите расстояния между любыми подряд стоящими тремя атомами: а) бензол; б) хлорбензол; в) пиридин; г) фосфорная кислота; д) хлорноватая кислота

3. Вычислите величины декартовых координат атомов в молекуле хлоруксусной кислоты и вычислите оптимальное расстояние между атомами H⁷ и O³:

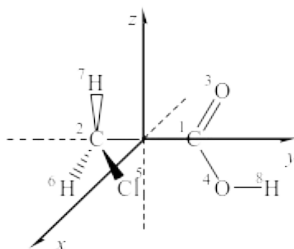


Таблица Характерные свойства некоторых элементов

<i>Z</i>	<i>Элемент</i>	<i>Радиус, Å</i>		
		<i>атомный</i>	<i>ковалентный по Полингу</i>	<i>экспериментальный</i>
1	H	0.78	0.30	0.31
2	He	1.28	—	0.28
3	B	0.83	0.88 0.76 0.68	0.84
4	C- C= C≡	0.91	0.77 0.67 0.60	0.76 0.73 0.69
5	N	0.71	0.70 0.60 0.55	0.71
6	O	0.60	0.66 0.55	0.66
7	P	1.15	1.10 1.00 0.93	1.07
8	S	1.04	1.04 0.94	1.05
9	Cl	1.07	0.99	1.02

*Экспериментальные уточненные данные [Dalton Trans., 2008, 2832-2838].

Подготовка презентаций по ключевым темам

1. Реализация численных методов в прикладных программных комплексах OpenOffice.org Calc (Microsoft Office), SciDAVis и решение задач построения кривых, поверхностей потенциальной энергии молекул по направлению физической химии, аналитической химии.
2. Реализация численных методов в прикладных программных комплексах Gamess PC, MaSK и решение задачи поиска частот колебаний, поиска оптимальной конфигурации молекул по направлению квантовой механики и квантовой химии с использованием вычислительных процедур.
3. Задание строения молекул в системе декартовых и сферических (z-матрица) координат. Спецификация молекулы (мультиплетность, заряд, симметрия и др.). 3D-визуализация молекул в программе MaSK. Оптимизация геометрии молекулы в рамках самосогласованного поля Хартри-Фока (RHF, ROHF, UHF). Оценка стабильности молекул. Выполнение расчетов в программе МОРАС.
4. Построение и анализ диаграммы энергетических уровней органических молекул в программе MaSK.

Для промежуточной аттестации (экзамен / зачёт / дифференцированный зачёт) приводится полный перечень вопросов и заданий, выносимых на экзамен / зачёт / дифференцированный зачёт

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

Типовой перечень вопросов к экзамену

1. Каковы условия применимости методов Ньютона и итераций?
2. В чем суть методов половинного деления, Ньютона и итераций?
3. Какой метод обычно дает самую быструю сходимость?
4. Как ставится задача интерполяции и какие виды интерполяции вы знаете?
5. В чем суть и геометрический смысл линейной интерполяции?
6. Что такое сплайн-интерполяция и в чем ее суть?
7. Какие типы приближенных методов решения обыкновенных дифференциальных уравнений Вы знаете? Назовите по одному примеру каждого типа.
8. Какова общая схема численных методов решения дифференциальных уравнений первого порядка?
9. Каков порядок точности при решении дифференциальных уравнений методами Эйлера, Рунге-Кутты второго и четвертого порядков?
10. Каким образом на практике следят за точностью при решении дифференциальных уравнений методами Рунге-Кутты второго и четвертого порядков? Обоснуйте этот способ.
11. В чем сходство и различие постановки задачи метода наименьших квадратов и задачи интерполяции?
12. Какие виды приближающих функций обычно применяются?
13. В чем суть метода приближения таблично заданной функции по методу наименьших квадратов линейной функцией?
14. Какова общая постановка задачи решения систем линейных уравнений?
15. С чем связана необходимость переставлять местами уравнения системы при решении?
16. В чем преимущество метода итераций перед другими методами?
17. В чем суть метода простых итераций, и каковы условия применимости данного метода?
18. В чем суть классического подхода к решению задач нахождения экстремума функций одной переменной?
19. Сформулируйте общую схему нахождения экстремума функций одной переменной при помощи численных методов.
20. Метод золотого сечения. Постановка задачи.
21. Сформулируйте общую схему нахождения экстремума функций многих переменных при помощи численных методов.
22. Метод координатного спуска и его реализация для функций многих переменных.
23. Метод наискорейшего координатного спуска, в чем его суть?
24. Сформулируйте определения генеральной совокупности, выборочной совокупности, средней величины, средней арифметической выборочной совокупности, дисперсии и стандартного отклонения выборочной совокупности?
25. Каков должен быть объем выборки? Принцип отбора вариант в выборочную совокупность.
26. Графические представления эмпирического распределения: гистограмма распределения частот, полигон распределения частот.
27. Дайте определения медианы, моды эмпирического распределения.

Таблица 9. Примеры оценочных средств с ключами правильных ответов

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
ОПК-1 – Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты				
Задание 3. Анализ и расчетно-теоретических работ химической направленности				
1.	комбинированного типа	Браузеры (например, Google) являются: а) серверами Интернет. б) антивирусными программами. в) трансляторами языка программирования. г) средством просмотра Web-страниц.	г	1
2.		Какой метод из итерационных обычно дает самую быструю сходимость? а) Жордана-Гаусса б) Зейделя	б	1
3.		Информационно-поисковые системы позволяют: а) осуществлять поиск, вывод и сортировку данных; б) осуществлять поиск и сортировку данных; в) редактировать данные и осуществлять их поиск; г) редактировать и сортировать данные.	а	1
4.		К каким методам относится метод прогонки? а) прямые методы; б) итерационные методы.	а	1
5.		Модель уравнения линейной регрессии имеет вид: а) $y = 1/a + b \cdot x + e$ б) $y = a + b \cdot x + e$	б	1

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
	Задание комбинированного типа	в) $y = b \cdot x^2 + e$ г) $y = e^{a + b \cdot x}$		
6.		Какой метод обычно дает самую быструю сходимость?	Из всех методов точных и итерационных, наиболее удачным считается и по временным затратам и по эффективности – метод Зейделя. Среди точных методов можно отметить – метод прогонки.	5
7.		Метод координатного спуска и его реализация для функций многих переменных.	<i>Идея метода:</i> Движение от начальной точки по направлению одной из осей координат до момента начала возрастания целевой функции, переход к направлению другой оси и т. д., пока не будет достигнута точка, движение из которой по любой оси координат с минимально возможным шагом приводит к увеличению значения целевой функции. Основные этапы поиска $\min f(x_1, \dots, x_n)$ методом координатного спуска: 1) выбор начального приближения; 2) выбор направления поиска, т.е. номера компоненты вектора $(x_1, x_2, \dots, x_n)$, которая будет изменяться; 3) вычисление значения производной целевой функции по выбранному аргументу увеличивается, то уменьшается, до тех пор, пока $f(x_1(k+1), x_2(k+1), \dots, x_n(k+1)) < f(x_1(k), x_2(k), \dots, x_n(k))$; 4) в противном случае производится возврат на п. 2) и выбор следующего направления поиска, при этом $x_i(0) = x_i(k)$, $i=1, 2, \dots, n$ (h – шаг поиска, $\text{sign}(z)$ – знак выражения (z); 5) если попытка движения с шагом h в любом из n возможных направлений приводит к ситуации, то осуществляется дробление шага: $h = h/p$ ($p > 1$) и вновь выполняется п. 4);	5-8

№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
	Задание комбинированного типа		б) поиск считается законченным, когда значение h становится меньше заданной точности ϵ .	
8.		Что такое сплайн-интерполяция и в чем ее суть?	Сплайн интерполяция – это кусочно заданная функция, то есть совокупность нескольких функций, каждая из которых задана на каком-то множестве значений аргумента, причём эти множества попарно непересекающиеся. Сплайны имеют многочисленные применения в вычислительных программах. В частности, сплайны двух переменных интенсивно используются для задания поверхностей в различных системах компьютерного моделирования. Сплайны двух аргументов называют би-сплайнами (например, бикубический сплайн), которые являются двумерными сплайнами, моделирующими поверхности.	5-8
9.		Для чего используется кластерный анализ и в какой области химического знания могут быть применены методы кластерного анализа?	Кластерный анализ представляет собой способ графического представления материала (объекта), дает возможность наглядно изучить результат. Это многомерная статистическая процедура по сбору данных, содержащих информацию о выборке объектов и упорядочиванию объектов в сравнительно однородные группы. Задача кластеризации относится к статистической обработке и может быть выполнена в любой вычислительной программе, включая Excel. В химии, методы кластерного анализа могут быть применимы при изучении структуры и свойств гомологов и (или) изомеров, при обработки данных в производственных масштабах.	5
10.		Предложите	Для обработки по методу	5-8

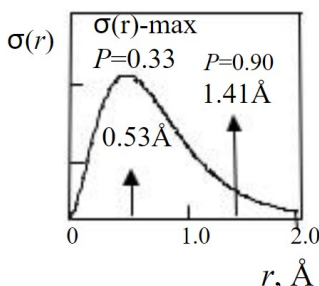
№ п/п	Тип задания	Формулировка задания	Правильный ответ	Время выполнения (в минутах)
	Задание комбинированного типа	программы или онлайн-редакторы для обработки результатов лабораторного исследования методом наименьших квадратов. $x = 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ 6 \ 7$ $8 \ 9$ $y = 0,95 \ 0,88 \ 0,81 \ 0,75$ $0,71 \ 0,67 \ 0,63 \ 0,60$	наименьших квадратов достаточно использовать приложение Excel с включением дополнительной функции. Для этого необходимо внести данные в табличном виде. Далее добавить функции, которые фигурируют в формулах и вычислить значения. На основании полученных результатов можно продемонстрировать график зависимости.	

ОПК-3 – Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники

11.	Задание закрытого типа	Волновая функция – это... а) величина, полностью описывающая состояние микрообъекта и любой квантовой системы; б) вероятность нахождения частицы в определенный момент времени t в точке пространства с координатами x, y, z ; в) величина, полностью описывающая состояние макрообъекта; г) функция волны.	а	1
12.		Волновая функция обязана удовлетворять ряду требований (несколько вариантов): а) однозначности и конечности во всем пространстве переменных; б) непрерывности, однозначности и конечности во всем пространстве переменных; в) должна быть, как минимум дважды дифференцируема и однозначна; г) нормированности, непрерывности, однозначности и конечности во всем пространстве переменных.	в, г	1
13.		Установите определитель для молекулы изобутена C_4H_8 :	а	1

		а) $\begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 0 \\ 1 & y & 1 & 1 \\ 0 & 1 & y & 0 \\ 0 & 1 & 0 & y \end{vmatrix}$ б) $\begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 0 \\ 1 & y & 1 & 0 \\ 0 & 1 & y & 0 \\ 0 & 0 & 1 & y \end{vmatrix}$ в) $\begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 1 \\ 1 & y & 1 & 0 \\ 0 & 1 & y & 1 \\ 1 & 0 & 1 & y \end{vmatrix}$ г) $\begin{vmatrix} y & 1 & 0 & 0 \\ 1 & y & 1 & 1 \\ 0 & 1 & y & 1 \\ 0 & 1 & 1 & y \end{vmatrix}$		
14.		Собственные волновые функции φ_n и φ_m являются <u>ортонормированными</u>, если выполняется условие: а) $\int \Psi_m^* \Psi_n d\tau = \delta_{mn}$ б) $\int \Psi_m^* \Psi_n d\tau = 0$ в) $\int \Psi_m^* \Psi_n d\tau = 1$ г) $\int \Psi_m^* \Psi_n d\tau \neq 0$	а	1
15.		Метод молекулярных орбиталей Хюккеля основан на ряде приближений: а) σ-электронным б) пренебрежение интегралами межэлектронного отталкивания в) π-электронным	б	1
16.	Задание открытого типа	Что описывает радиальная функция в теории строения атома и с какими квантовыми числами связана функция?	Радиальная функция распределения описывает изменения плотности как функции расстояния от выбранной частицы. В теории строения атома это соответствует вероятности нахождения электрона в элементе объема от расстояния до ядра. А поскольку, главное квантовое число определяет разрешенные квантовые значения полной энергии электрона и характеризует размер электронных орбиталей, что является мерой расстояния между электроном и ядром. Таким образом, радиальная функция связана с главным	5

			квантовым числом. Радиальная функция также связана с орбитальным квантовым числом поскольку определяет возможные квантовые значения орбитального момента количества движения электрона и связана с кинетической энергией.	
17.		Что описывает функция углового распределения в теории строения атома и с какими квантовыми числами связана функция?	В теории строения атома функция углового распределения определяет пространственную конфигурацию простейших форм орбиталей. Таким образом, это соответствует орбитальному квантовому числу. Угловая функция также связана с магнитным квантовым числом, которое определяет разрешенные направления в пространстве вектора орбитального момента количества движения.	5
18.		Решить задачу и описать этапы вычисления: Вычислите декартовы координаты хлорноватистой кислоты HOCl. Известны радиусы по Полингу (Å) для $\text{H} = 0,3$; $\text{O} = 0,66$, $\text{Cl} = 0,99$.	Пронумеруем атомы и центрируем на координатной сетке. Поскольку молекула укладывается в плоскости ху, то целесообразно упростить вычислительную модель. Таким образом, связь $\text{O}^1\text{-Cl}^2$ будет вытянута вдоль оси х, а Н будет направлен в третью четверть под углом 104 градуса. Что приблизительно соответствует валентному углу в молекуле воды. Для O^1 координаты соответствуют (0;0;0). Для Cl^2: $x = (R(\text{O}) + R(\text{Cl})) \cdot \cos(0) = (0,66 + 0,99) \cdot 1 = 1,65$	5-8

			$y=(R(O)+R(Cl))\cdot\sin(0)=$ $=(0,66+0,99)\cdot 0=0$ $z=0.$ Для H³: $x=(R(H)$ $+R(O))\cdot\cos(180-104)=$ $=(0,3+0,66)\cdot 0,24=0,23$ $y=(R(H)$ $+R(O))\cdot\sin(76)=$ $=(0,3+0,66)\cdot 0,97=0,93$ $z=0.$ Следовательно, атомы в молекуле хлорноватистой кислоты имеют следующие декартовы координаты: $O^1 (0;0;0)$ $Cl^2 (1,65;0;0)$ $H^3 (0,23;0,93;0)$	
19.		Решить задачу и определить вычислительную модель: Электрон заключен в полиионовой молекуле длиной 20 нм. Рассчитайте энергию основного состояния?	Движение электрона в полиионовой молекуле можно представить в рамках модели движения частицы в прямоугольном ящике с бесконечно высокими стенками. Тогда, энергию электрона в основном состоянии можно вычислить по формуле: $E_1=(\pi^2\cdot n^2\cdot (h/2\pi)^2)/$ $(2\cdot m_e\cdot a^2).$ Таким образом, $E_1=((3,14)^2\cdot 1^2\cdot (1,054\cdot 10^{-34}$ $\text{Дж/с}))/((2\cdot 9,11\cdot 10^{-31}$ $\text{кг})\cdot (20\cdot 10^{-9}\text{м})^2)=1,503\cdot 10^{-22}$ Дж	5-8
20.		Ниже представлен график функции радиального распределения электронной плотности для основного состояния атома водорода. О чем свидетельствует максимум на кривой и значение 1,41Å? 	Функция $\sigma(r)$ имеет максимум при $r=0,53\text{Å}$, что свидетельствует максимальной вероятности нахождения электрона на расстоянии отличном от нуля. Данное расстояние совпадает с радиусом первой орбиты по теории Бора. Однозначно точно указать объем пространства, в котором вероятность нахождения электрона будет равна 1 (100%),	5-8

		невозможно, как невозможно и указать, в какой точке пространства находится электрон в данный момент. Поэтому указывается объем пространства, в пределах которого вероятность нахождения электрона составляет величину 0,9 (90%). Такая область пространства называется орбиталью электрона, в отличие от орбиты в классической теории. Для основного состояния атома водорода радиус орбитали составляет 1,41Å.	
21.	Установите стационарные точки на поверхности функции вида $f(x_1, x_2) = 0.5x_1^2 - 4x_1x_2 + 9x_2^2 + 3x_1 - 14x_2 + 2.$ Запишите этапы вычислений.	Найдем первые производные по x_1 и x_2 Далее, решим систему полученных уравнений, выполнив условие минимума функции $\frac{\partial f}{\partial q_i} = 0$ Вычислим элементы матрицы Гессе: $H_{1,2} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} = \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} \end{vmatrix}$ Диагоналируем полученную матрицу Гессе: $\begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0,$ получим уравнение, из которого находим корни. Получим диагональную матрицу вида: $\begin{vmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{vmatrix}.$ Далее, оцениваем полученные диагональные элементы: если диагональные элементы имеют отрицательные знаки, $f'' < 0$, то экстремум	5-8

			представляет собой максимум (глобальный/локальный), а если элементы имеют положительные знаки, $f'' > 0$, то экстремум – минимум (глобальный/локальный) Если $f'' = 0$, то функция в данной точке является точкой перегиба и с точки зрения квантовой химии не имеет большого значения.	
22.		Мерой химической активности молекул является: 1. разность между энергиями граничных молекулярных орбиталей 2. волновая функция атомных и молекулярных орбиталей 3. расстояние между атомами взаимодействующих молекул 4. энергия основного состояния квантовой системы Заполните недостающие строки по смыслу: Волновая функция – это величина, полностью описывающая _____ и любой квантовой системы.	1 состояние микрообъекта	3- 5
23.	Задание комбинированного типа	Заполните недостающие строки по смыслу: В данном методе, полная _____ молекулы строится из волновых функций, описывающих поведение отдельных электронов _____, создаваемом остальными электронами и всеми атомными ядрами. Установите, о каком методе идет речь	волновая функция в усредненном поле метод самосогласованного поля	3- 5

Полный комплект оценочных материалов по дисциплине (модулю) (фонд оценочных средств) хранится в электронном виде на кафедре, утверждающей рабочую программу дисциплины (модуля).

7.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю)

Таблица 10. Технологическая карта рейтинговых баллов по дисциплине (модулю)

№ пп	Контролируемые мероприятия	Количество мероприятий/ баллы	Максимальное количество баллов	Срок предоставления
Основной блок				
1	Посещение занятий	0.5 балла за занятие	5	по расписанию
2	Активность студента на занятии	0.5 балла за занятие		по расписанию
3	Выступление на семинарских занятиях:			
3.1	полный ответ по вопросу	1 балл за занятие	6	по расписанию
3.2	дополнение	0.1 балла за занятие	4	
4	Выполнение самостоятельной работы	5 баллов	15	по расписанию
5	Выполнение контрольной работы	10 баллов за работу	20	по расписанию
Промежуточный контроль			50 баллов	
6	Экзамен	10 баллов за вопрос	50 баллов	по расписанию
Итого			100 баллов	

Таблица 11 - Система штрафов (для одного занятия)

Показатели	Балл
Опоздание (более двух раз)	-2
Не готов(а) к практической части лабораторных занятий	-3
Нарушение учебной дисциплины	-2
Пропуск лекций без уважительной причины (за одно занятие)	-3
Пропуск лабораторного 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)	Зачтено
85–89	4 (хорошо)	
75–84		
70–74		
65–69		
60–64	3 (удовлетворительно)	
Ниже 60	2 (неудовлетворительно)	Не зачтено

При реализации дисциплины (модуля) 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

1. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. 7-е изд. – М.: БИНОМ, 2012. 635 с.;
2. 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.;
3. 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
4. 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>
5. Золотарева Н.В. Численные методы анализа в химии: Учебно-методическое пособие. – Астрахань: Издатель: Сорокин Роман Васильевич, 2020. – 78 с.

8.2. Дополнительная литература

5. 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.;
6. 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>;
7. Харитонов Ю.Я., Аналитическая химия. Аналитика 2. Количественный анализ. Физико-химические (инструментальные) методы анализа [Электронный ресурс] / Ю.Я. Харитонов - М.: ГЭОТАР-Медиа, 2014. - 656 с. - ISBN 978-5-9704-2941-9 - Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785970429419.html>;
8. Информационные технологии в экономике и управлении (эффективная работа в MS Office 2007) [Электронный ресурс]: Учебное пособие / Г. М. Киселев, Р.В. Бочкова, В. И. Сафонов. – М.: Издательско-торговая корпорация «Дашков и К», 2013. – 272 с. Режим доступа: <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785394017551.html>.

8.3. Интернет-ресурсы, необходимые для освоения дисциплины (модуля)

1. Электронная библиотека «Астраханский государственный университет» собственной генерации на платформе ЭБС «Электронный Читальный зал – БиблиоТех»: <https://biblio.asu.edu.ru> Учетная запись образовательного портала АГУ;
2. Электронно-библиотечная система (ЭБС) ООО «Политехресурс» «Консультант студента». Многопрофильный образовательный ресурс «Консультант студента» является электронной библиотечной системой, предоставляющей доступ через сеть Интернет к учебной литературе и дополнительным материалам, приобретенным на основании прямых договоров с правообладателями. Каталог в настоящее время содержит около 15000 наименований: www.studentlibrary.ru. Регистрация с компьютеров АГУ;
3. Электронная библиотечная система издательства ЮРАЙТ, раздел «Легендарные книги»: www.biblio-online.ru;
4. Электронная библиотечная система IPRbooks www.iprbookshop.ru.

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 занятий. В учебном процессе для освоения дисциплины используются следующие технические средства – компьютерное, мультимедийное оборудование для проведения семинарско-практических работ.

10. ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ) ПРИ ОБУЧЕНИИ ИНВАЛИДОВ И ЛИЦ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Рабочая программа дисциплины (модуля) 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. При обучении лиц с ограниченными возможностями здоровья учитываются их индивидуальные психофизические особенности. Обучение инвалидов осуществляется также в соответствии с индивидуальной программой реабилитации инвалида (при наличии).

Для лиц с нарушением слуха возможно предоставление учебной информации в визуальной форме (краткий конспект лекций; тексты заданий, напечатанные увеличенным шрифтом), на аудиторных занятиях допускается присутствие ассистента, а также сурдопереводчиков и тифлосурдопереводчиков. Текущий контроль успеваемости осуществляется в письменной форме: обучающийся письменно отвечает на вопросы, письменно выполняет практические задания. Доклад (реферат) также может быть представлен в письменной форме, при этом требования к содержанию остаются теми же, а требования к качеству изложения материала (понятность, качество речи, взаимодействие с аудиторией и т. д.) заменяются на соответствующие требования, предъявляемые к письменным работам (качество оформления текста и списка литературы, грамотность, наличие иллюстрационных материалов и т. д.). Промежуточная аттестация для лиц с нарушениями слуха проводится в письменной форме, при этом используются общие критерии оценивания. При необходимости время подготовки к ответу может быть увеличено.

Для лиц с нарушением зрения допускается аудиальное предоставление информации, а также использование на аудиторных занятиях звукозаписывающих устройств (диктофонов и т. д.). Допускается присутствие на занятиях ассистента (помощника), оказывающего обучающимся необходимую техническую помощь. Текущий контроль успеваемости осуществляется в устной форме. При проведении промежуточной аттестации для лиц с нарушением зрения тестирование может быть заменено на устное собеседование по вопросам.

Для лиц с ограниченными возможностями здоровья, имеющих нарушения опорно-двигательного аппарата, на аудиторных занятиях, а также при проведении процедур текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации могут быть предоставлены необходимые технические средства (персональный компьютер, ноутбук или другой гаджет); допускается присутствие ассистента (ассистентов), оказывающего обучающимся необходимую техническую помощь (занять рабочее место, передвигаться по аудитории, прочитать задание, оформить ответ, общаться с преподавателем).