

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич  
Должность: врио ректора  
Дата подписания: 05.09.2022 08:34:59  
Уникальный программный ключ:  
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»



Утверждаю:  
Руководитель ООП: \_\_\_\_\_ П.М. Пахомов  
28 апреля 2021 г.

Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)  
**Аддитивные модели на основе  
многоугольных чисел**

Направление подготовки  
04.04.01 Химия

Направленность (профиль)  
Физическая химия

Для студентов 1 курса очной формы обучения

Составитель: к.х.н., доцент Павлов А.С. \_\_\_\_\_

Тверь, 2021

## I. Аннотация

### 1. Цель и задачи дисциплины:

**Целью** освоения дисциплины является: дать магистрантам углубленное изучение основных принципов феноменологической теории и показать ее плодотворность при решении задач расчета и прогнозирования физико-химических свойств веществ, необходимых для практики и не изученных экспериментально.

**Задачами** освоения дисциплины являются: научить студентов строить аддитивные схемы и применять их при расчетах и прогнозировании физико-химических свойств веществ.

### 2. Место дисциплины в структуре ООП:

Дисциплина входит в Элективные дисциплины 3 обязательной части Блока 1. «Дисциплины» учебного плана.

Дисциплина «Аддитивные модели на основе многоугольных чисел» расширяет и углубляет содержание дисциплин «Молекулярное моделирование», «Геометрия молекул и кристаллов в числах».

### 3. Объем дисциплины: 4 зачетные единицы, 144 академических часа, в том числе:

**контактная аудиторная работа:** лекции - 30 часов, лабораторные работы - 30 часов, в т.ч. практическая подготовка - 30 часов;

**самостоятельная работа:** 57 часов, контроль 27 часов.

### 4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы:

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине	Семестр
ОПК-1 Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов,	ОПК-1.1. Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук; ОПК-1.2. Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы	1

программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук. Владеть навыком записи аддитивных схем, учитывающих взаимное влияние атомов в явном виде	
ОПК-2 Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук	ОПК-2.1. Проводит критический анализ результатов собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук; ОПК-2.2. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук.	1

**5. Форма промежуточной аттестации и семестр прохождения:**  
экзамен в 1-м семестре.

**6. Язык преподавания русский.**

**II. Содержание дисциплины, структурированное по темам с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий:**

**1. Для студентов очной формы обучения:**

№	Учебная программа – наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)		Самостоятельная работа (час.)	Контроль
			Лекции	Лабораторные занятия		
1	Схемы расчёта свойств в ряду изомеров замещения, родственных базисному соединению	46	12	12	10	12
2	Корреляции «топологический индекс матрицы расстояний МГ – свойство алкана»	50	12	12	14	12
3	Корреляции «коэффициенты характеристического полинома матрицы смежности молекулярных графов алкана – свойство	48	12	12	12	12

	вещества»					
	<b>Итого</b>	<b>144</b>	<b>36</b>	<b>36</b>	<b>36</b>	<b>36</b>
	В том числе в интерактивной форме				60%	

### III. Образовательные технологии

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

1. Учебная программа
2. Планы и методические указания по подготовке выполнению лабораторных работ
3. Методические рекомендации по организации самостоятельной работы, перечень вопросов для самостоятельной работы
4. Перечень основных понятий, изучение которых предусмотрено данной дисциплиной
5. Программа итогового экзамена по дисциплине

### IV. Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации

#### Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции

Этап формирования компетенции, в котором участвует дисциплина	Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков (2-3 примера)	Показатели и критерии оценивания компетенции, шкала оценивания
<b>Начальный</b> <b>Знать:</b> понятие математической модели и очертить основные этапы математического моделирования	<b>Тест № 1. Что такое математическая модель?</b> а) Приближенное описание какого-либо объекта (явления, процесса) в терминах математики (вместе с граничными и начальными условиями). б) Определенное математическое выражение, описывающее изучаемый процесс или явление. в) Исходные предпосылки в постановке задачи.  <b>Тест № 2 Молекула метана имеет форму:</b> а) пирамиды; б) параллелепипеда; в) тетраэдра; г) конуса.	Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего

	<p><b>Тест № 3. Квантовое число l характеризует ...</b></p> <p>a) энергию электрона на атомной орбитали</p> <p>b) собственные значения оператора квадрата орбитального момента импульса электрона</p> <p>c) собственные значения оператора проекции орбитального момента импульса электрона</p> <p>d) ориентацию спинового момента электрона</p>	<p>смысла– 2 балла; Имеется верное решение только части задания– 1 балл. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3 балла – «5»</p>
<p><b>Уметь:</b> - высказать и записать (в виде общего математического выражения) основной постулат феноменологической теории связи свойств веществ со строением молекул, пояснить его квантово-механическое обоснование и теоретико-графовое истолкование;</p>	<p>1. Молекулярный топологический индекс (МТИ) Шульца определяется как сумма элементов матрицы <math>\nu</math> (<math>A+D</math>), где <math>A</math> и <math>D</math> – матрицы смежности и расстояния, а <math>\nu</math> – матрица строка степеней и вершин. Рассчитайте МТИ для 2-метилбутана.</p> <p>2. Изобразите вид кривых потенциальной энергии внутреннего вращения для молекул вида <math>CH_2X-CHXY</math></p>	
<p><b>Владеть:</b> навыками построения математической (аддитивной) модели изомеров вершинного замещения базисной</p>	<p><b>Тест № 1 Общая формула алканов:</b></p> <p>a) <math>C_nH_{2n}</math>;</p> <p>b) <math>C_nH_{2n+1}</math> ;</p> <p>c) <math>C_nH_{2n-2}</math>;</p> <p>d) <math>C_nH_{2n+2}</math>.</p> <p><b>Тест № 2 Изомеры различаются:</b></p> <p>a) составом и строением молекул;</p> <p>b) составом молекул и химическими свойствами;</p> <p>c) физическими свойствами и строением</p>	<p>Правильно выбран вариант ответа – 1 балл Тест из 3 заданий: 1 балл – «3», 2 балла – «4», 3 балла – «5»</p>

<p>структуры (с известной группой симметрии) на основе разбиения многоугольных чисел.</p>	<p>молекул; d) составом молекул и физическими свойствами.</p> <p><b>Тест № 3. В каком случае свойство замещенных метана является кубической функцией числа заместителей?</b></p> <p>a) При учете только валентных взаимодействий. b) При учете парных невалентных взаимодействий. c) При учете тройных невалентных взаимодействий.</p>	
---	--	--

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

##### *а) Основная литература:*

1. Клинов А.В. Математическое моделирование химико-технологических процессов [Электронный ресурс]: учебное пособие / А.В. Клинов, А.Г. Мухаметзянова. — Электрон. текстовые данные. — Казань: Казанский национальный исследовательский технологический университет, 2009. — 144 с. — 978-5-7882-0774-2. — Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/62483.html>

##### *б) Дополнительная литература:*

1. Криштафович, В.И. Физико-химические методы исследования: учебник / В.И. Криштафович, Д.В. Криштафович, Н.В. Еремеева. - Москва: Издательско-торговая корпорация «Дашков и К°», 2016. - 208 с. - (Учебные издания для бакалавров). - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-394-02417-7; То же [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=453028>

#### **VI. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины:**

##### **Учебная программа:**

#### **I. СХЕМЫ РАСЧЕТА СВОЙСТВ В РЯДУ ИЗОМЕРОВ ЗАМЕЩЕНИЯ, РОДСТВЕННЫХ БАЗИСНОМУ СОЕДИНЕНИЮ**

Составление ряда X-, ХУ-...замещенных изомеров исходной молекулы. Построение расчетных схем для замещенных метана, этана, метилсилана, метиламина, пропана, этилена, бензола, циклопропана, призмана, кубана и др. Построение расчетных схем, различающихся выбором параметров. Установление взаимосвязи между различными схемами.

#### **II. КОРРЕЛЯЦИИ «ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ ИНДЕКС МАТРИЦЫ РАССТОЯНИЙ МГ – СВОЙСТВО АЛКАНА»**

Топологические индексы на основе матрицы смежности и матрицы расстояний.

Конструирование топологических индексов Загребской группы ученых, индексов Рандича, Винера, Балабана, МТИ, Харари и др.

Расчет энтальпий образования алканов с использованием топологических индексов матрицы смежности и матрицы расстояний химических графов алканов.

### **III. КОРРЕЛЯЦИИ «КОЭФФИЦИЕНТЫ ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКОГО ПОЛИНОМА МАТРИЦЫ СМЕЖНОСТИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ГРАФОВ АЛКАНА – СВОЙСТВО ВЕЩЕСТВА»**

Вычисления собственных значений и коэффициентов характеристических полиномов (КХП) матриц смежности и матриц расстояний химических графов алканов.

Построение аддитивной схемы для алканов на основе коэффициентов характеристических полиномов матриц смежности химических графов.

Расчет физико-химических свойств алканов с использованием коэффициентов характеристических полиномов квадрата матрицы смежности химических графов. Расчет энтальпий образования аминов и радикалов с использованием коэффициентов характеристических полиномов матрицы смежности химических графов. Расчет энтальпий образования свободных радикалов по аддитивной схеме, с учетом ближайшего окружения атомов. Расчет энтальпий образования свободных радикалов по аддитивной схеме в третьем приближении. Расчет энтальпий образования алканов с использованием коэффициентов характеристических полиномов матриц смежности химических графов и топологических индексов Винера, Балабана, МТИ, Харари и др.

## **Планы и методические указания по подготовке к выполнению лабораторных работ:**

### **Планы занятий:**

1. Составление ряда X-, ХУ-...замещенных изомеров исходной молекулы. Построение расчетных схем для замещенных метана, этана, метилсилана, метиламина, пропана, этилена, бензола, циклопропана, призмана, кубана и др.. Установление взаимосвязи между различными схемами.
2. Построение аддитивной схемы для алканов на основе коэффициентов характеристических полиномов матрицы смежности химических графов. Расчет физико-химических свойств алканов с использованием коэффициентов характеристических полиномов квадрата матрицы смежности химических графов.
3. Расчет свойств изомеров замещения циклических алифатических углеводородов.
4. Расчет характеристик фазовых превращений (энтальпий образования, испарения, плавления). Расчет температур плавления, кипения.

При подготовке к лабораторным занятиям следует использовать лекции и книги из указанного выше списка литературы.

### **Рекомендации по подготовке к контрольным работам и экзамену**

Дисциплина «Аддитивные модели на основе многоугольных чисел» изучается в 1-м семестре. По ней учебным планом предусмотрен экзамен (1-й сем.), который включают в себя: устные ответы на вопросы.

При ответах на вопросы принимается во внимание знание и понимание (по существу) материала, его полнота и глубина освещения, аргументированность, культура речи и пр.

#### **Перечень основных понятий, изучение которых предусмотрено данной дисциплиной:**

Математическая модель.

Математическое моделирование.

Вычислительная математика.

Вычислительные методы в физике и химии.

Взаимодействия атомов.

Валентные и невалентные взаимодействия.

Атом-атомное представление.

Расчетные схемы

Замещенные метана, силана, моногермана, станнана, этана, пропана, этилена, бензола, циклопропана, кубана.

Генерирование и систематизация изомеров.

Взаимосвязь между различными схемами.

Предсказательные возможности теории.

Численные расчеты.

Метод наименьших квадратов (МНК).

Энтальпии образования. Энтропии. Энергии Гиббса. Теплоты испарения.

Расчет и эксперимент (сопоставление данных).

#### ***Рекомендации по подготовке к экзамену:***

Самостоятельное изучение дисциплины целесообразно начинать, ознакомившись с программой дисциплины и требованиями к минимуму содержания, знаниям и умениям по данной дисциплине. Уяснив общую структуру курса, ознакомившись с зачетными вопросами, можно переходить к его поэтапному изучению, привлекая для этого материалы лекций и рекомендованную учебную литературу.

Изучая дисциплину, необходимо добиться полного усвоения ее теоретических основ, научиться применять теоретические знания для решения практических задач. Содержание незнакомых терминов, встретившихся в процессе освоения учебного материала, можно выяснить при помощи справочной литературы. Более сложные вопросы уточняются на консультациях с преподавателем кафедры.

Экзамен по дисциплине включает:

- устный ответ на вопросы и выполнение контрольного задания;
- При ответе на вопросы следует четко знать определения, дополнять каждый теоретический вопрос соответствующими примерами и графиками.



При оценке устного ответа на вопросы принимается во внимание:  
В ходе экзамена преподаватель имеет право задавать дополнительные вопросы.

**Контрольные вопросы:**

1. Что такое математическая модель. Приведите примеры.
2. Назовите основные этапы математического моделирования.
3. Назовите вычислительные методы в физике и химии.
4. Что такое численные методы решения задач?
5. Из чего складывается общая погрешность решения задачи?
6. Подсчитайте число валентных и невалентных взаимодействий в молекулах этана и пропана (в шахматных конформациях).
7. Подсчитайте число валентных и невалентных взаимодействий в молекулах этилена и бензола.
8. Подсчитайте число валентных и невалентных взаимодействий в молекулах циклопропана и циклобутана (в последнем случае – для плоского цикла и с учетом инверсии).
9. Составьте схемы расчёта свойств X-замещённых метана и его аналогов при учете парных взаимодействий атомов. Установите число параметров схем. Оцените предсказательные возможности теории.
10. Определение параметров (в кДж/моль) МНК дает для энтальпий образования  $\Delta_f H^0_{298 (г)}$  X-замещённых метана при X = D, T, F, Cl:

$$\Delta_f H^0_{CH_{4-l}D_l} = -74,829 - 4,409 l + 0,094 l^2 \quad (l = 0, 1, 2, 3, 4);$$

$$\Delta_f H^0_{CH_{4-l}T_l} = -74,897 - 3,851 l + 0,086 l^2 \quad (l = 0, 1, 2, 3, 4);$$

$$\Delta_f H^0_{CH_{4-l}F_l} = -73,38 - 170,76 l - 11,28 l^2 \quad (l = 0, 1, 2, 3, 4);$$

$$\Delta_f H^0_{CH_{4-l}Cl_l} = -72,56 - 16,12 l + 2,46 l^2 \quad (l = 0, 1, 2, 3, 4).$$

Рассчитайте величины  $\Delta_f H^0_{298 (г)}$  дейтеро-, тритий-, фтор-, хлорзамещённых метана. Сопоставьте результаты расчета с экспериментом.

11. Составьте схемы расчёта свойств X-замещённых этана (в шахматных конформациях) при учете парных взаимодействий атомов. Проведите численные расчеты энтальпий образования.
12. Составьте схемы расчёта свойств X-замещённых бензола при учете парных взаимодействий атомов. Проведите численные расчеты энтальпий образования.

**Программа итогового экзамена по дисциплине:**

1. Математическая модель.
2. Математическое моделирование.
3. Методы решения задачи, к которой приводит математическая модель. Общая погрешность решения задачи.
4. Вычислительные методы в физике и химии.
5. Численные методы.
6. Молекула как система взаимодействующих атомов. Валентные и невалентные взаимодействия.
7. Атом-атомное представление (общая математическая модель).

8. Принципы построения расчетных схем.
9. Схемы расчета свойств замещенных метана и его аналогов (силана, моногермана, станнана).
10. Схемы расчета свойств замещенных этана и его аналогов.
11. Схемы расчета свойств замещенных этилена.
12. Схемы расчета свойств замещенных бензола.
13. Схемы расчета свойств замещенных циклопропана.
14. Схемы расчета свойств замещенных кубана.
15. Взаимосвязь между различными схемами.
16. Предсказательные возможности теории.
17. Численные расчеты термодинамические свойств веществ (энтальпии образования, энтропии, энергии Гиббса, теплоты испарения).
18. Адекватность математической модели. Сопоставление результатов расчета с экспериментом.

**VIII. Перечень педагогических и информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем:**

информационные технологии:

использование компьютеров для поддержки излагаемого учебного материала

программное обеспечение:

MSOffice 365 proplus

MSWindows 10 Enterprise

GoogleChrome

Origin 8.1 Sr2

ISISDraw 2.4 Standalone

HyperChem 8.0

информационно-справочные системы:

<http://www.edu.ru/> Федеральный портал «Российское образование»

<http://elibrary.ru/> Научная электронная библиотека

**VII. Материально-техническое обеспечение**

- Электронная образовательная среда ТВГУ  
<https://www.tversu.ru/informatisation/>
- Университетский центр Интернет
- Компьютерная класс с 10 объединенными в сеть компьютерами со средствами мультимедиа

**VIII. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины**

№п.п.	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Реквизиты документа, утвердившего изменения

1.	Раздел V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	Добавлены новые пособия в основной список литературы	Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-технологического факультета
----	---	--	--