

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Смирнов Сергей Николаевич

Должность: врио ректора

Дата подписания: 05.09.2022 08:34:53

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)  
**Молекулярное моделирование**

Направление подготовки

04.04.01 химия

Направленность(профиль)

Физическая химия

Для студентов 1 курса очной формы обучения

Составитель: д.х.н., профессор Виноградова М.Г.

Тверь, 2021

## I. Аннотация

### 1. Наименование дисциплины в соответствии с учебным планом:

Молекулярное моделирование

#### Цель и задачи дисциплины:

**Целью** освоения дисциплины является: познакомить студентов с основными идеями и методами математического моделирования и их применением в различных областях физической химии.

**Задачами** освоения дисциплины являются:

- освоение методов моделирования молекулярных систем,
- выбор правильного теоретического подхода в решении конкретных физико-химических задач в материаловедении, биофизических приложениях, нанотехнологии.

### 2. Место дисциплины в структуре ООП:

Дисциплина «Молекулярное моделирование» относится к дисциплинам по выбору вариативной части учебного плана подготовки магистров.

### 3. Объем дисциплины:

бачетных единиц, **216** академических часа, в том числе:

**контактная аудиторная работа:** лекции **15** часов, лабораторные работы - **45** часов, в т. ч. лабораторная практическая подготовка - **45** часов;

**контактная внеаудиторная работа:** контроль самостоятельной работы **10** часов;

**самостоятельная работа:** **119** часов, контроль – **27** часов.

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

<b>Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)</b>	<b>Планируемые результаты обучения по дисциплине</b>
<b>ОПК-1</b> Способен выполнять комплексные экспериментальные и	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;

<p>расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения</p>	<p>ОПК-1.2.Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук.</p>
<p><b>ОПК-2</b> Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук</p>	<p>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.</p>

**5. Форма промежуточной аттестации и семестр проведения:**  
экзамен во 2-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 и	Лабораторные занятия		
1	Введение.Понятие о методах моделирования и моделях. Виды моделей. Цели моделирования.	13	1	0	12	0

2	Метод Монте-Карло. Виды ансамблей и свойства их функций.	23	1	6	13	3
3	Межмолекулярные взаимодействия. Статистическая термодинамика реальных систем..	31	2	6	20	3
4	Методы молекулярной динамики	24	2	6	13	3
5	Вид и природа потенциалов молекулярного взаимодействия	24	2	6	13	3
6	Алгоритмы вычисления невалентных взаимодействий	28	2	6	14	6
7	Численное интегрирование уравнений движения	21	1	4	13	3
8	Алгоритмы термодинамических характеристик среды	22	1	4	14	3
9	Методы расчета характеристик систем по данным моделирования	30	3	7	17	3
	<b>Итого</b>	<b>216</b>	<b>15</b>	<b>45</b>	<b>119</b>	<b>27</b>
	В том числе <b>контактная внеаудиторная работа</b> : контроль самостоятельной работы					10

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

1. Учебная программа
2. Планы и методические указания по подготовке к выполнению лабораторных работ.
3. Методические рекомендации по организации самостоятельной работы, перечень вопросов для самостоятельной работы
4. Примерная тематика контрольных работ (рефератов)
5. Рекомендации по подготовке к контрольным работам, экзамену
6. Требования к оформлению и тематика курсовых работ

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

Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции ПК-2 владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии:

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>Промежуточный Владеть:</b> методами решения систем линейных уравнений с целью получения корней.	<b>Кейс:</b> <b>1.</b> Перечислите основные задачи кристаллохимии? а) определение, описание и систематизация кристаллических структур; б) интерпретация кристаллических структур; в) предсказание корреляции структура-свойства. <b>2.</b> Однородность кристаллов это: а) независимость состава от направления; б) одинаковость свойств во всем объеме; в) одинаковость свойств по одинаковым направлениям;	Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла– 2 балла; Имеется верное решение только части задания– 1 балл. 1 балл – «3» 2 балла – «4»

	<p>г) различие свойств по разным направлениям.</p> <p><b>3. Точечные элементы симметрии это:</b></p> <p>а) только оси симметрии;  б) только центр инверсии;  в) только зеркальные плоскости симметрии;  г) поворотные оси, зеркальные плоскости, центр симметрии;  д) плоскости скольжения и винтовые оси;  е) трансляции.</p>	3 балла – «5»
<p><b>Уметь:</b> пояснить, как учитывается жесткость молекулы; записать потенциалы внутреннего вращения молекул;</p>	<p><b>1. Внутренняя симметрия кристалла.</b> Трансляция. Параллелепипеды повторяемости. Кристаллическая решетка. Элементарная ячейка. Винтовые оси. Плоскости скользящего отражения. Решетки Бравэ. Пространственные группы.</p> <p><b>2. Симметрия молекул и внешней формы кристаллов.</b> Кристаллографические точечные группы (32 кристаллических класса). Сингонии (распределение классов).</p>	<p>Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2 балла; Имеется верное решение только части задания – 1 балл.  1 балл – «3»  2 балла – «4»  3 балла – «5»</p>
<p><b>Знать:</b> как составить гомологический ряд изомеров замещения молекул</p>	<p><b>1. Рентгеноструктурный анализ</b> позволяет определить?</p> <p>а) атомную структуру вещества;  б) молекулярную структуру вещества;  в) надмолекулярную структуру вещества.</p> <p><b>2. Электронография это:</b></p>	<p>Правильно выбран вариант ответа – 1 балл  Тест из 3 заданий:  1 балл – «3»,  2 балла – «4»,  3 балла – «5»</p>

	<p>а) взаимодействие инфракрасного излучения с веществом;</p> <p>б) резонансное поглощение или излучение электромагнитной энергии веществом, содержащим ядра с ненулевым спином во внешнем магнитном поле;</p> <p>в) метод изучения строения вещества, основанный на рассеянии ускоренных электронов на исследуемом образце;</p> <p><b>3.</b> Кристаллическая решетка магния относится к:</p> <p>а) ОЦКУ;</p> <p>б) ГПУ;</p> <p>в) ГКУ;</p>	
--	---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--

**Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции ПК-3 готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований**

<b>Этап формирования компетенции, в котором участвует дисциплина</b>	<b>Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков (2-3 примера)</b>	<b>Показатели и критерии оценивания компетенции, шкала оценивания</b>
<p><b>Промежуточный Владеть:</b> методами решения систем линейных уравнений, исследуемого гомологического ряда.</p>	<p><b>Кейс:</b></p> <p><b>1.</b> Предмет, процесс или явление, имеющее уникальное имя и представляющее собой единое целое, называют:</p> <p>а) объектом;</p> <p>б) моделью;</p> <p>в) алгоритмом.</p> <p><b>2.</b> Кардинально противоположным методом моделирования по отношению к детерминированным является ?</p> <p>а) стохастические;</p> <p>б) математические;</p>	<p>Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла;</p> <p>Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2 балла;</p> <p>Имеется верное решение только</p>

	<p>в) физические; г) непрерывные.</p> <p><b>3.</b>С помощью какого типа имитационного моделирования лучше реализовать модель следующей системы: Пусть объектом управления является водонагреватель, который нагревает до температуры <math>T</math>. Температуру <math>T</math> нужно поддерживать на заданном уровне <math>T_0</math>?</p> <p>а) динамические системы; б) агентное моделирование; в) дискретно-событийное моделирование;</p>	<p>части задания– 1 балл. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3 балла – «5»</p>
<p><b>Уметь:</b> высказать и записать основной постулат феноменологической теории связи свойств веществ со строением молекул, пояснить его квантово-механическое обоснование и теоретико-графовое истолкование</p>	<p><b>1.</b>Сущность математического моделирования и его основных классов: аналитического и имитационного?</p> <p><b>2.</b>Дайте схематическое описание постановки и проведения молекулярно - динамического вычислительного эксперимента.?</p>	<p>Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла; Дано верное решение, но допущены несущественные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2 балла; Имеется верное решение только части задания– 1 балл. 1 балл – «3» 2 балла – «4» 3 балла – «5»</p>
<p><b>Знать:</b> исходные предпосылки, необходимые для построения аддитивной схемы, и показать ход решения</p>	<p><b>1.</b> Аналитическое моделирование относится к ...</p> <p>а) математическому; б) имитационному; в) физическому; г) моделированию в реальном масштабе времени.</p>	<p>Правильно выбран вариант ответа – 1 балл Тест из 3 заданий: 1 балл – «3», 2 балла – «4», 3 балла – «5»</p>



<p>математической задачи, к которой приводит модель;</p>	<p><b>2.</b> Представление существенных свойств и признаков объекта моделирования в выбранной форме называется?</p> <p>а) систематизацией;  б) моделированием;  в) формализацией;</p> <p><b>3.</b> Модель по сравнению с моделируемым объектом содержит?</p> <p>а) меньше информации;  б) больше информации;  в) а, б, в;  г) столько же информации;  д) все перечисленные свойства.</p>	
----------------------------------------------------------	------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--

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

**а) Основная литература:**

1. Заводинский, В.Г. Компьютерное моделирование наночастиц и наносистем / В.Г. Заводинский. - Москва :Физматлит, 2013. - 175 с. : ил., схем., табл. - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-9221-1397-7 ; То же [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=457710>
2. С. В. Звонарев Основы математического моделирования / Учебное пособие/ Уральский федеральный университет. 124 с, 2019 . Режим доступа: [https://elar.urfu.ru/bitstream/10995/68494/1/978-5-7996-2576-4\\_2019.pdf](https://elar.urfu.ru/bitstream/10995/68494/1/978-5-7996-2576-4_2019.pdf)

**б) Дополнительная литература:**

1. Склярова Е.А. Компьютерное моделирование физических явлений [Электронный ресурс] : учебное пособие / Е.А. Склярова, В.М. Малютин. — Электрон. текстовые данные. — Томск: Томский политехнический университет, 2012. — 152 с. — 978-5-4387-0119-4. — Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/34668.html>
2. Каймин В. А., Информатика: Учебник/ 6-е изд. - М.: НИЦ ИНФРА-М, 2015. - 285 с.: 60x90 1/16. - (Высшее образование: Бакалавриат) (Переплёт) ISBN 978-5-16-010876-6 <http://znanium.com/go.php?id=542614>

**VI. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины**

- <http://library.tversu.ru>

- <http://www.iprbookshop.ru/>
- <https://biblioclub.ru/>
- <https://www.nature.com/>
- <https://rd.springer.com/>

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

### **Учебная программа:**

#### **I. ВВЕДЕНИЕ. ПОНЯТИЕ О МЕТОДАХ МОДЕЛИРОВАНИЯ И МОДЕЛЯХ. ВИДЫ МОДЕЛЕЙ. ЦЕЛИ МОДЕЛИРОВАНИЯ.**

Математическая модель как приближенное описание какого-либо объекта (явления, процесса) в терминах математики. Три основных этапа математического моделирования: 1) исходные предпосылки и построение модели (формулировка исходных положений, составление математических выражений); 2) решение математической задачи, к которой приводит модель (выбор математического аппарата, реализация алгоритмов и программных средств, получение выходной количественной информации); 3) установления адекватности (соответствия) модели изучаемому объекту (экспериментальная проверка модели).

#### **II. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО. ВИДЫ АНСАМБЛЕЙ И СВОЙСТВА ИХ ФУНКЦИЙ.**

Феноменологическая (физическая) модель: молекула как система взаимодействующих атомов. Парные взаимодействия и кратные. Валентные и невалентные взаимодействия. Виды взаимодействий в молекулах (по отдельным классам соединений): замещенные метана, этана и пропана (и их аналогов силана, моногермана, дисилана, метилсилана и т.д.), замещенные этилена, бензола, циклопропана, кубана и др.

Соответствие с другими молекулярными моделями (механическая, электронно-ядерная, теоретико-графовая).

#### **III. МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ. СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА РЕАЛЬНЫХ СИСТЕМ.**

Статистические выражения для основных термодинамических функций - внутренней энергии, энтропии, энергии Гельмгольца, энергии Гиббса, теплоемкости и химического потенциала. Молекулярная сумма по состояниям и сумма по состояниям макроскопической системы. Поступательная сумма по состояниям. Составляющие энтропии, внутренней энергии и теплоемкости, обусловленные поступательным движением.

#### **IV. МЕТОДЫ РАСЧЕТА ХАРАКТЕРИСТИК СИСТЕМ ПО ДАННЫМ МОДЕЛИРОВАНИЯ**

Методология построения схем расчета и прогнозирования.

Объекты исследования. Генерирование и систематизация изомеров на множестве выбранных объектов.

Вывод рабочих формул, удобных для расчета физико-химических свойств изучаемых соединений в разных приближениях.

Механическое описание молекулярной системы. Фазовые  $G$  - и  $\mu$ -пространства. Статистические средние значения макроскопических величин. Основные постулаты статистической термодинамики. Плотность вероятности (функция распределения) и ее свойства. Микроканонический ансамбль. Канонический ансамбль.

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

### **Планы занятий:**

1. Понятие математической модели. Основные этапы математического моделирования. Вычислительная математика. Вычислительные методы в физике и химии.
2. Взаимодействия атомов. Валентные и невалентные взаимодействия. Виды взаимодействий: транс (t), гош (g), цис (c), транс-транс (tt), транс-гош (tg) и т.д. Подсчеты взаимодействий в отдельных молекулах (метан, этан и пропан, этилен, бензол, циклопропан, кубан) (6 часов).
3. Основания феноменологических методов. Свойство вещества как сумма свойств, приходящихся на отдельные взаимодействия атомов (общая математическая модель): запись для разных молекул (8 часов).
4. Построение расчетных схем для замещенных метана и его аналогов, этана, пропана, этилена, бензола, циклопропана, кубана. Генерирование и систематизация изомеров (на базе теории перечисления Пойа). Вывод рабочих формул для расчета и предсказания физико-химических свойств изучаемых соединений в разных приближениях. Установление взаимосвязи между различными схемами. Предсказательные возможности. Численные расчеты энтальпий образования, энтропий, энергий Гиббса, мольных объемов, теплот испарения и т.д. Сопоставление результатов расчета с экспериментальными данными, получение расчетным путем новой количественной информации (10 часов).

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

По дисциплине «Молекулярное моделирование» учебным планом предусмотрен экзамен, 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 контрольным работам, экзамену***

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:

1. полнота, глубина освещения вопроса, аргументированность изложения материала;
2. умение связывать теорию с практикой;
3. культура речи.

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:

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

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

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

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

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 замещённых метана и его аналогов (силана, моногермана, станнана).
10. Схемы расчета свойств замещённых этана и его аналогов.
11. Схемы расчета свойств замещённых этилена.
12. Схемы расчета свойств замещённых бензола.
13. Схемы расчета свойств замещённых циклопропана.
14. Схемы расчета свойств замещённых кубана.
15. Взаимосвязь между различными схемами.

16. Предсказательные возможности теории.
17. Численные расчеты термодинамические свойства веществ (энтальпии образования, энтропии, энергии Гиббса, теплоты испарения).
18. Адекватность математической модели. Сопоставление результатов расчета с экспериментом.

### **Требования к оформлению и тематика курсовых работ**

Курсовая работа по дисциплине «Молекулярное моделирование» является официальной, самостоятельной, творческой и, в немалой степени, научно-исследовательской работой студентов. Ее оценка научным руководителем фиксируется в зачетной книжке и впоследствии выставляется в диплом. Более того, материалы курсовой работы могут быть использованы студентом в его дальнейшей научной и учебной деятельности: при подготовке научных докладов для выступления на различных конференциях. Качественно подготовленная курсовая работа может стать первоначальным фундаментом выпускной квалификационной работы и впоследствии даже магистерской или кандидатской диссертации.

*Задачи написания курсовой работы:*

1. Приобретение новых теоретических знаний в соответствии с темой работы и заданием руководителя;
2. Формирование у студентов навыков и умений проведения различного рода научно-исследовательских работ;
3. Показать умение студентов находить и анализировать различные источники учебного и научного характера;
4. Научить студентов применять полученные на первом курсе обучения знания о различных закономерностях химических процессов;
5. Показать способность студентов к творческой и научно-исследовательской работе, умение формулирования самостоятельных выводов по решению той или иной теоретической или практической проблемы, возможность аргументировать свое заключение;
6. Выработка у студентов навыков и умений правильно оформлять проведенное исследование;
7. Совершенствование профессиональной подготовки будущих специалистов.

***К основным требованиям, предъявляемым к курсовой работе, относятся:***

1. Курсовая работа должна быть выполнена студентом самостоятельно и носить творческий и научно-исследовательский характер;
2. Она должна основываться на анализе различного материала, начиная от периодической и справочной и заканчивая научной и учебной литературой;
3. Курсовая работа должна быть правильно оформлена, в соответствии со всеми требованиями;
4. Изложенный материал должен быть хорошо аргументированным;

5. Структура работы должна отличаться стройностью, логической продуманностью и полностью соответствовать заявленной тематике.

## *1. ПЕРВЫЙ ЭТАП*

### *1.1. Выбор темы курсовой работы*

Тему курсовой работы можно выбрать из примерного перечня. Допускается написание курсовой работы и по теме, которая отсутствует в примерном перечне тем, но только после предварительной консультации и утверждения ее научным руководителем. В противном случае работа может быть не зачтена.

### *1.2. Регистрация темы курсовой работы и выбор научного руководителя*

После того как определились с интересующей темой будущей курсовой работы, необходимо зарегистрировать ее на кафедре органической химии. Дублирование тем курсовых работ не допускается, в связи с этим, рекомендуется, как можно раньше выбрать и зарегистрировать тему курсовой работы.

### *1.3. Консультирование с научным руководителем*

После того как вы выбрали тему курсовой работы, необходимо встретиться с научным руководителем и проконсультироваться с ним. Для этого подойдите в часы консультации вашего научного руководителя (время и дату консультаций преподавателей кафедры можно узнать у лаборанта кафедры при регистрации темы или на стенде кафедры), уточните тематику работы, согласуйте план курсовой работы, а также выясните все интересующие вас вопросы. В связи с этим рекомендуется заранее посмотреть определенную литературу по теме вашей работы, составить предварительный план работы, записать все непонятные и интересующие вас вопросы и т.д.

Научный руководитель осуществляет контроль за процессом выполнения работы, а по окончании ее подготовки проверяет и дает на нее рецензию.

## *2. ВТОРОЙ ЭТАП*

### *2.1. Составление плана курсовой работы*

План работы – это первоначальная основа работы, от грамотного составления которой зависит правильность написания и полнота раскрытия выбранной темы. Составление плана – это непростая задача, так как при этом уже необходимо владение материалом по выбранной теме курсовой работы, и, кроме того, он должен с одной стороны полно раскрывать содержание заявленной темы, а с другой наоборот не выходить за рамки предмета исследования. Более того, план должен быть логически выстроенным, т. е. последовательно раскрывать обозначенную тему.

Согласно устоявшейся традиции по написанию научных работ план должен состоять из введения, двух-трех глав по два-три параграфа в каждой (не допускается глава без разделения хотя бы на два параграфа), заключения и списка использованных источников и литературы. *При этом надо помнить, что название глав не должно ни в коем случае повторять название темы, а название параграфов – название глав.*

Студент может составить план самостоятельно, но тогда, конечно же, требуется согласование плана с научным руководителем. Кроме того, в процессе написания, в связи с нахождением студентом интересного материала, а также по другим причинам, план работы может меняться и корректироваться. И в этом случае также необходимо предварительное согласие научного руководителя.

## *2.2. Подбор и анализ источников и литературы*

Основная часть работы должна быть основана на анализе различных источников научного (различные монографии, статьи, диссертации и авторефераты диссертаций) и учебного плана (например, учебники или учебные пособия) как отечественных, так и зарубежных авторов. Данная литература либо берется в библиотеке, либо из Интернет-ресурсов, либо из других источников.

Кроме того, студент должен показать способности поиска необходимой информации для написания исследования, поэтому в данном пособии не приводится список рекомендуемой литературы, так как необходимые материалы студенты должны найти сами и тем самым продемонстрировать свои научно-исследовательские навыки по поиску информации.

*Любое цитирование как научной и учебной литературы, так и периодических и справочных изданий, должно быть дословным либо изложенным своими словами, максимально повторяющими смысл первоисточника, а после каждого цитирования обязательно ставится ссылка, в которой указываются все данные об авторе и источнике цитируемого материала.*

## *3. ТРЕТИЙ ЭТАП*

### *3.1. Структура курсовой работы*

Структура курсовой работы должна соответствовать избранной теме, способствовать ее полному раскрытию и решению поставленных цели и задач. В структуру курсовой работы входят следующие элементы:

1. Титульный лист.
2. Содержание.
3. Введение.
4. Основное содержание, включающее в себя теоретическую часть, которая должна содержать не менее двух параграфов.
5. Заключение.
6. Список источников и литературы.
7. Приложения.

### *3.2. Требования к структурным элементам курсовой работы*

#### *3.2.1. Титульный лист*

Титульный лист является первой страницей курсовой работы и служит источником информации, необходимой для обработки и поиска документа.

#### *3.2.2. Содержание*

Содержание включает введение, наименование всех разделов, подразделов, заключение, список использованных источников и литературы,



приложения с указанием номеров страниц, на которых размещается начало материала.

### 3.2.3. Введение

Курсовая работа начинается с введения, однако это не означает, что начинать ее написание необходимо с данного раздела. Как это не парадоксально звучит, но рекомендуется приступать к написанию введения в последнюю очередь или, по крайней мере, когда будет закончена содержательная часть курсовой работы.

Во введении обязательно должны содержаться указания на:

- актуальность темы исследования;
- объект курсовой работы;
- предмет курсовой работы;
- цели и задачи исследования;
- методологическая основа исследования;
- теоретическая основа курсовой работы;
- структура работы.

*Актуальность темы исследования.* В данном разделе указывается значимость проведения исследования именно по данной теме на современном этапе развития химической промышленности и химической науки, а также обосновывается позиция автора по выбору им тематики курсовой работы. Кроме того, здесь может быть затронута практическая и теоретическая ценность исследования в выбранном направлении. Однако необходимо помнить, что актуальность не должна занимать слишком много места, оптимальный объем составляет 1/2 или 2/3 страницы.

*Цели и задачи исследования.* Цели исследования predetermined предметом курсовой работы, непосредственно вытекают из него, а задачи, в свою очередь, predetermined целью исследования. Чаще всего цель исследования одна, а задач, естественно, несколько. Цель курсовой работы – это тот ориентир, то конечное состояние, которое автор стремится в итоге достигнуть. Цели с задачами соотносятся как общее и частное, то есть задачи – это определенные промежуточные пункты, которые необходимо достичь, чтобы осуществить общую цель.

### 3.2.4. Содержательная часть курсовой работы

Данный раздел курсовой работы состоит из нескольких глав и параграфов, в которых собственно и проводится само исследование, необходимо, чтобы они были последовательными и логически выстроенными. Поэтому следует соблюдать логическое построение материала и плавные переходы мысли из одного параграфа в другой. При этом очень важно, чтобы автор не только переписывал имеющийся материал, но и глубоко анализировал его, приводя различные размышления по данному поводу. В идеале курсовая работа должна содержать не просто анализ, а критический анализ различных источников, а автор должен излагать и свое видение проблематики.

*Оптимальный объем содержательной части курсовой работы должен составлять примерно 13-18 страниц.*

### *3.2.5. Заключение*

В заключении приводится краткий ретроспективный обзор проведенной в исследовании работы, указываются узловые моменты исследования, излагаются теоретические и практические выводы, к которым пришел студент в результате исследования, а также предложения по улучшению, оптимизации состояния изучаемого вопроса. Они должны быть краткими и четкими, дающими полное представление о содержании, значимости, обоснованности и эффективности предлагаемых разработок. Оно представляет результат научного творчества студента, краткий итог курсовой работы. По объему заключение составляет 1-2 страницы.

### *3.2.6. Список литературы*

В содержание данный элемент должен быть отражен как Список источников и литературы. Он должен включать в себя не менее 10 источников, используемых при написании работы. Литературные источники группируются в алфавитном порядке или в порядке использования материала источника в курсовой. Если авторы работ являются однофамильцами, учитывается алфавит их инициалов. Если в списке есть работы одного автора, то они выстраиваются по алфавиту названий книг и статей.

Источники на иностранных языках, как и Интернет-сайты указываются после перечня основной литературы на русском языке в алфавитном порядке.

### *3.2.7. Приложения*

В приложении следует помещать вспомогательный материал, который при включении в основную часть загромождает текст. К вспомогательному материалу относятся большие таблицы, графики, схемы, рисунки.

## *3.3. Научный руководитель*

Научный руководитель осуществляет руководство на протяжении всего времени подготовки и написания курсовой работы, а в конце дает рецензию на выполненную работу и на защите определяет, оценивает качество и самой работы, и непосредственно процесса защиты работы студентом. В связи с этим можно обращаться к научному руководителю по поводу всех неясных или уточняющих вопросов. К ним относятся:

- помощь научного руководителя при выборе тематики работы и составления ее плана;
- оказание помощи в подборе учебных и научных источников;
- рекомендации по написанию курсовой работы, в том числе разрешение спорных вопросов;
- разъяснение правил оформления курсовой работы;
- предварительная проверка отдельных глав или параграфов работы и т. д. и т. п.

## *3.4. Наиболее часто встречаемые ошибки при написании курсовой работы*

- содержание работы полностью или частично не соответствует заявленной тематике;
- переписывание одного или нескольких учебников;

- отсутствуют резюльтивные выводы, к которым пришел автор в результате исследования;
- не показана работа с периодическими изданиями;
- отсутствует авторское мнение в работе.

#### *4. ЧЕТВЕРТЫЙ ЭТАП*

##### *4.1. Оформление курсовой работы*

###### *4.1.1. Общие требования*

Курсовая работа набирается на компьютере в текстовом редакторе Microsoft Word. Рекомендуется следующий вариант форматирования текста: шрифт – TimesNewRoman размером 14 пт., междустрочный интервал – полуторный, выравнивание текста на странице – по ширине. Работа печатается на одной стороне листа белой бумаги формата А4 со следующими полями: левое – 25 мм, верхнее – 20 мм, нижнее – 20 мм, правое – 15 мм. Рекомендуемый объем курсовой работы составляет 20-25 страниц печатного текста.

*На титульном листе между сведениями об авторе работы и его фамилией ставится подпись автора, подтверждающая личное написание курсовой работы.*

Каждая структурная часть курсовой работы (введение, глава, заключение, список использованных источников и литературы) начинается с новой страницы.

Страницы курсовой работы следует нумеровать арабскими цифрами, соблюдая сквозную нумерацию по всему тексту работы в центре нижней части листа без точки. Титульный лист включают в общую нумерацию страниц, но номер страницы на титульном листе не проставляется.

Наименования структурных элементов курсовой работы: «СОДЕРЖАНИЕ», «ВВЕДЕНИЕ», «ЗАКЛЮЧЕНИЕ», «СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ И ЛИТЕРАТУРЫ», а также названия глав следует печатать полужирным шрифтом, выравнивание по центру без абзацного отступа и точки в конце прописными буквами, не подчеркивая.

Заголовки параграфов, пунктов и подпунктов следует печатать с прописной буквы, не подчеркивая, без точки в конце. Если заголовок включает несколько предложений, их разделяют точками. Переносы слов в заголовках не допускаются.

Расстояние между заголовками курсовой работы, разделами основной части и текстом должно быть не менее 3 (2 x 1,5 интервала) интервалов.

Введение и заключение не нумеруются.

Главы, параграфы, пункты и подпункты работы нумеруются арабскими цифрами с точкой .

###### *4.1.2. Ссылки и сноски*

*Сноски* в курсовой работе применяются тогда, когда автор желает либо уточнить какой-либо факт, либо расшифровать то или иное утверждение, или что-либо прокомментировать и т. п. Сноски приводятся в конце страницы, а нумерация и оформление осуществляется также как и в случае использования ссылок .

*Ссылки* же применяются в том случае, когда используются или цитируются источники или литература, а также другие факты, взятые из источников и литературы. Рекомендуется использовать в курсовой работе *подстрочные ссылки с постраничной нумерацией арабскими цифрами*.

Для оформления ссылок и сносок следует использовать функцию в Microsoft Word 97-2003 «вставка – ссылка – вставить сноску», в Microsoft Word 2007 «ссылки – вставить сноску». Знак ссылки, если примечание относится к отдельному слову, должен стоять непосредственно у этого слова. Если же он относится к предложению или группе предложений, то ставится после знака препинания в их конце. Подстрочные ссылки нумеруются арабскими цифрами без скобки на каждой странице, начиная с цифры 1. На каждой следующей странице нумерацию ссылок начинают сначала.

В ссылке обязательно приводятся следующие данные: фамилия и инициалы автора(ов), название работы, место, год издания и страница(ы) откуда цитируется или другим образом используется в курсовой работе данный источник или литература.

Если цитирование производится не по первоисточнику, а по работе другого автора, этот факт необходимо обозначать в ссылке. В таких случаях она начинается со слов «*Цит. по:*», а далее оформляется, как было указано выше. Цитирование источника может быть дословным, в этом случае такая цитата заключается в кавычки в тексте курсовой работы, а любое исправление в ней не допускается. Если же вы все равно сделали незначительные изменения, то необходимо сразу после них указать в круглых скобках то, что вы изменили и поставить первые буквы вашего имени и фамилии. Если же цитирование осуществляется не дословно, но при этом главная мысль заимствована из источника, тогда заключать цитату в кавычки не требуется, однако необходимо поставить ссылку.

#### *4.1.3. Оформление списка использованных источников и литературы*

Список использованных источников и литературы должен состоять из четырех разделов:

1. Периодические издания.
2. Научная и учебная литература включает в себя различные научные и учебные издания, монографии, статьи, диссертации, авторефераты диссертаций и т.д.
3. Издания на иностранном языке.
4. Интернет-ресурсы.

#### *4.1.4. Иллюстрации*

Иллюстрации (фотографии, рисунки, схемы, графики) располагаются в курсовой работе непосредственно на странице с текстом после абзаца, в котором они упоминаются впервые, или отдельно на следующей странице. Иллюстрации, которые расположены на отдельных листах, должны включаться в общую нумерацию страниц.

Иллюстрации обозначают словом «Рисунок» и нумеруют последовательно в пределах параграфа. Номер иллюстрации должен состоять из номера параграфа и порядкового номера иллюстрации, разделенных

точкой. Например: *Рис.1.2* (второй рисунок первого параграфа). Номер иллюстрации, ее название и поясняющие подписи помещают последовательно под иллюстрацией. Если в курсовой работе приведена одна иллюстрация, то ее не нумеруют и слово «Рисунок» не пишут.

Иллюстрации должны иметь наименование, которое дается после номера рисунка. При необходимости иллюстрации снабжают поясняющими подписями (подрисовочный текст). Номер иллюстрации, ее название и поясняющие подписи помещают под иллюстрацией.

Иллюстрации должны быть расположены так, чтобы их было удобно рассматривать без поворота работы или с поворотом по часовой стрелке. Качество иллюстраций должно обеспечивать их четкое воспроизведение.

#### *4.1.5. Таблицы*

Цифровой материал, как правило, должен оформляться в виде таблиц. Каждая таблица должна иметь заголовок, который располагают над таблицей и печатают в начале строки. Надпись «Таблица» с указанием её номера помещается в правом верхнем углу над заголовком таблицы. Заголовок и слово «Таблица» начинают с прописной буквы. Подчеркивать заголовок не следует. Точка в конце заголовка не ставится.

Заголовки граф должны начинаться с прописных букв, подзаголовки - со строчных, если они составляют одно предложение с заголовком, и с прописных, если они самостоятельные. Деление заголовка таблицы по диагонали не допускается. Высота строк в таблице должна обеспечивать четкое воспроизведение включенной в нее информации. Графа «№ п/п» в таблицу не включается.

Таблицы нумеруются последовательно (за исключением таблиц, приведенных в приложении) в пределах параграфа. В правом верхнем углу над соответствующим заголовком таблицы помещается надпись «Таблица» с указанием её номера. Номер таблицы должен состоять из номера параграфа и порядкового номера таблицы, разделенных точкой, например: «Таблица 1.2» (вторая таблица первого параграфа). Если в курсовой работе одна таблица, её не нумеруют и слово «Таблица» не пишут.

Таблица размещается после первого упоминания о ней в тексте таким образом, чтобы ее можно было читать без поворота работы или с поворотом по часовой стрелке.

Таблицу с большим количеством строк допускается переносить на другой лист. При переносе части таблицы на другой лист (страницу) слово «Таблица» и номер её указываются один раз справа над первой частью таблицы, над другими частями пишут слово «Продолжение». Если в работе несколько таблиц, то после слова «Продолжение» указывается номер таблицы, например: «Продолжение табл. 1.2». При переносе таблицы на другой лист (страницу) заголовок помещается только над первой её частью.

Таблицу с большим количеством граф допускается делить на части и помещать одну часть под другой в пределах одной страницы. Если строки графы таблицы выходят за формат страницы, то в первом случае в каждой части таблицы повторяется её головка, во втором случае – боковик.

Если повторяющийся в разных строках графы таблицы текст состоит из одного слова, его после первого написания допускается заменять кавычками; если из двух и более слов, то при первом повторении его заменяется словами «То же», а далее – кавычками. Ставить кавычки вместо повторяющихся цифр и иных символов не допускается. Если цифровые или иные данные в какой-либо строке таблицы не приводятся, то в ней ставится прочерк.

#### *4.2. Правила скрепления курсовой работы*

Курсовая работа должна быть аккуратно скреплена путем использования переплета или с помощью использования папки – скоросшивателя. Не допускается при скреплении курсовой работы использовать папку с индивидуальными файлами, в которые по отдельности вкладывается каждый лист, так как это затрудняет делать исправления в процессе ее проверки.

*Наиболее часто встречаемые ошибки при оформлении курсовой работы:*

- неправильное оформление (отсутствуют номера страниц, сноски, список источников и литературы оформлен не в соответствии с вышеуказанными правилами и т. д.);
- небольшое количество источников в списке использованных источников и литературы;
- использование в работе различных шрифтов;
- текст или полностью, или частично не выровнен по ширине;
- точки в конце заголовка;
- неправильно оформлены рисунки;
- неправильно оформлены таблицы.

### *5. ПЯТЫЙ ЭТАП*

#### *5.1. Проверка и защита курсовой работы*

##### *5.1.1. Проверка курсовой работы научным руководителем*

После того как курсовая работа выполнена и надлежащим образом оформлена, рекомендуется еще раз ее внимательно прочитать и проверить на наличие различных ошибок, в том числе и грамматических, и неточностей. После этого работа сшивается и сдается на кафедру органической химии, где регистрируется лаборантом кафедры и передается на проверку научному руководителю. Если работа соответствует всем предъявляемым и выше перечисленным требованиям, то она допускается к защите. При этом научный руководитель подготавливает рецензию на курсовую работу, в которой могут быть указаны определенные незначительные замечания или основные вопросы, на которые следует обратить внимание при защите курсовой работы. Курсовая работа возвращается обратно студенту для подготовки к защите.

Если работа не соответствует предъявляемым требованиям, то она не допускается до защиты и передается студенту на доработку. При этом на не допущенную работу также научным руководителем составляется рецензия, в которой отражаются те недостатки, которые необходимо устранить.

#### ***Темы курсовых работ:***

- 1. Молекулярное моделирование эллипсометрических характеристик для оценки оптической изомерии природных гликозидов.**

2. Оценка жесткости цепи полиамида по энергии её деформации в тэта-точке в зависимости от числа амидных групп в элементарном звене.
3. Расчётная схема оценки энтальпий образования метил-замещённых бензола
4. Энзимолитическое индексы восстановления гликозидов в зависимости от количества присоединенной серы
5. Распределения частиц по ориентации в процессе однородной деформации полимерной матрицы
6. Корреляция энергии когезии галоген-замещенных бензола в зависимости положения заместителя;
7. Корреляция структура свойство замещенных этана в приближении молекулярной механики.
8. Межмолекулярное взаимодействие и кинетика термического разложения ионных жидкостей
9. Оценка межмолекулярного взаимодействия в комплексе цистеин – ПЭГ в присутствии ионов серебра в растворе.
10. Моделирование проницаемости клеточных мембран хвойных пород соединениями серы методом полупрозрачных периодических граничных условий.
11. Супрамолекулярные структуры белков в растворе в зависимости от их вторично и третичной пространственной организации

## **VI. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины**

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**

1. Компьютеры

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

№ п.п .	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Реквизиты документа, утвердившего изменения
1.	Раздел III. Объем дисциплины.	Откорректированы академические часы лекций и практических занятий согласно учебному плану на 2021-2022 уч. год	Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-технологического факультета
2.			