

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич  
Должность: врио ректора  
Дата подписания: 16.05.2024 13:02:41  
Уникальный программный ключ:  
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**  
**ФГБОУ ВО «ТВЕРСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

24 апреля 2024 г.



Рабочая программа дисциплины

## **Физико-химические модели**

Закреплена за кафедрой:	<b>Физической химии</b>
Направление подготовки:	<b>04.03.01 Химия</b>
Направленность (профиль):	<b>Экспертная и медицинская химия</b>
Квалификация:	<b>Бакалавр</b>
Форма обучения:	<b>очная</b>
Семестр:	<b>8</b>

Программу составил(и):

*канд. хим. наук, доц., Русакова Н.П.*

Тверь, 2024

## 1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

### Цели освоения дисциплины (модуля):

Целью освоения дисциплины является: дать специалистам 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.

### Задачи:

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

Цикл (раздел) ОП: Б1.В

### Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Дополнительные главы квантовой химии  
 Избранные главы физической химии  
 Физические методы исследования  
 Химические основы биологических процессов  
 Квантовая механика и квантовая химия  
 Стереохимия  
 Физическая химия  
 Химическая технология  
 Органическая химия  
 Физика  
 Математика  
 Строение вещества

**Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:**

Научно-исследовательская работа  
 Математические модели в корреляциях "структура-свойство"  
 Симметрия молекул и кристаллов  
 Преддипломная практика

## 3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

<b>Общая трудоемкость</b>	4 ЗЕТ
Часов по учебному плану	144
<b>в том числе:</b>	
аудиторные занятия	55
самостоятельная работа	22
часов на контроль	27

## 4. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

ПК-1.1: Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР

Уровень 1 математические правила и разделы, химические формулы и способы отображения химических веществ  
 в общих чертах основные аддитивные схемы расчета свойств-структуры соединений первого (по связям, по атомам) и второго

поколения;

основные топологические индексы: Винера, Рандича, Балабана, Хосоя и т.д.

- Уровень 1 использовать математический аппарат при решении конкретных задач сделать выбор аддитивной схемы, топологического индекса для вычислений свойств вещества в зависимости от заданных параметров
- Уровень 1 способностью проводить физико-химические расчеты с помощью известных схем и топологических индексов для молекулярных систем, в том числе с помощью компьютерных программ методиками записи молекулярных графов и составления матриц расстояний на их основе, в том числе с помощью компьютерного обеспечения навыками молекулярного моделирования и работы с разными квантово-химическими программами

ПК-1.2: Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР

- Уровень 1 правила техники безопасности при работе в лаборатории и на компьютере основы работы с программным обеспечением персонального компьютера в учебной аудитории
- Уровень 1 проводить эксперимент в лабораторных условиях и при пользовании компьютера
- Уровень 1 умением пользоваться методиками, использования знания норм техники безопасности

ПК-1.3: Готовит объекты исследования

- Уровень 1 приемы работы и создания научной графики с использованием Excel, основные макроскопические свойства молекулярных систем и их связь со структурой, номенклатуру органических соединений и номенклатуру хиральных соединений способы построения матриц по молекулярным графам; основы построения проекций Фишера, Ньюмена методы представления молекулярных систем в виде графов, структурных формул, стереохимических формул, проекций Фишера, Ньюмена
- Уровень 1 работать с компьютером на уровне пользователя, обрабатывать результаты научных экспериментов с использованием методов математической статистики и приложений Excel и других; проводить вычисление топологических индексов по результатам построения матриц, структурных формул;
- Уровень 1 навыками работы с компьютерными программами статистической и графической обработки экспериментальных данных с использованием общепринятого программного обеспечения; способами сборки топологических индексов и методами их вычисления для молекул методами построения аддитивных схем и способами их расчета для отдельных молекул

ПК-2.1: Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных)

- Уровень 1 основные распространенные интернет-системы поиска (Google, Yandex и др), а так же системы химической направленности (базы данных: NIST, AIST, Aquila, ChemPort и др.) возможности поисковых сетевых ресурсов и их примерное наполнение
- Уровень 1 вести поиск информации химической направленности: последних

публикаций по научной теме, широко известных фактов, данных электронного строения, структуры и физико-химических свойств исследуемых веществ, полученных как теоретическими, так и экспериментальными методами

Уровень 1 навыками работы с компьютерным программным обеспечением и интернет-ресурсами

ПК-2.2: Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)

Уровень 1 методы и средства сбора, обработки, хранения, передачи и накопления информации; основные понятия логических, математических и технических аспектов архитектуры компьютеров, локальных сетей и баз данных, экспертных систем и технологии разработки и использования программного обеспечения; принципы моделирования для решения функциональных и вычислительных задач

Уровень 1 использовать вычислительную технику и программное обеспечение применительно к профессиональной деятельности, в том числе к поиску патентных материалов в области химического моделирования и топологии, и электронных баз данных физико-химических свойств и химического строения

Уровень 1 навыками работы в WINDOWS, MicrosoftOffice и в специализированных пакетах прикладных программ; основными информационными технологиями ввода и обработки текстовой и графической информации

## 5. ВИДЫ КОНТРОЛЯ

Виды контроля в семестрах:	
экзамены	8

## 6. ЯЗЫК ПРЕПОДАВАНИЯ

Язык преподавания: русский.

## 7. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Код занят.	Наименование разделов и тем	Вид занятия	Семестр / Курс	Часов	Источники	Примечание
	Раздел 1. Топология и теория графов в расчетах свойств гетеросистем					
1.1	Топология и теория графов в расчетах свойств гетеросистем	Лек	8	10	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л1.5 Л1.6Л2.1 Л2.2	
1.2	Топология и теория графов в расчетах свойств гетеросистем	Лаб	8	13		
1.3	Топология и теория графов в расчетах свойств гетеросистем	Ср	8	12		
1.4	Топология и теория графов в расчетах свойств гетеросистем	Экзамен	8	14		

	Раздел 2. Корреляции «структура молекулы с гетероатомом – свойство» на основе топологических индексов и КХП матриц смежности молекулярных графов					
2.1	Корреляции «структура молекулы с гетероатомом – свойство» на основе топологических индексов и КХП матриц смежности молекулярных графов	Лек	8	12		
2.2	Корреляции «структура молекулы с гетероатомом – свойство» на основе топологических индексов и КХП матриц смежности молекулярных графов	Лаб	8	20		
2.3	Корреляции «структура молекулы с гетероатомом – свойство» на основе топологических индексов и КХП матриц смежности молекулярных графов	Ср	8	10		
2.4	Корреляции «структура молекулы с гетероатомом – свойство» на основе топологических индексов и КХП матриц смежности молекулярных графов	Экзамен	8	13		

### Список образовательных технологий

1	Игровые технологии
2	Дискуссионные технологии (форум, симпозиум, дебаты, аквариумная дискуссия, панельная дискуссия, круглый стол, фасилитированная и т.д.)
3	Информационные (цифровые) технологии
4	Технологии развития критического мышления
5	Технологии развития дизайн-мышления
6	Активное слушание

## 8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

### 8.1. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации

1. выполнение работ лабораторного практикума -20 баллов максимум  
способ:  
традиционный – решение задач по поиску корреляционных соотношений с регрессионным графиком

результаты:

углубленная проработка темы

Выполнение лабораторных работ является необходимым, но не достаточным условием получения положительной оценки

2. выполнение самостоятельной работы -10 баллов максимум

способ:

на компьютере

результаты:

1. обзор темы своей научной работы, методики и объектов исследования, представленный в виде презентации

2. список патентов по заданной теме, осуществленный по базам данных, оформленный в соответствии с требованиями.

Выполнение самостоятельной работы по индивидуальной теме является необходимым, но не достаточным условием получения положительной оценки

3. контрольная работа № 1- 10 баллов максимум

контрольная работа № 2 - 10 баллов максимум

способ:

традиционный (коллоквиум)

результаты:

оформленные по заданию бумажные бланки с решениями

4. посещаемость - 10 баллов

## **8.2. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации**

Вопросы к подготовке (1 часть):

1. Модель и моделирование. Цели моделирования Виды моделирования

2. Математическая модель, физическая модель. Свойства моделей. Формы представления моделей. Отличие идеального моделирования от материального

3. Когнитивная модель. Содержательная модель. Разновидности содержательных моделей

4. Отличие концептуальной модели от содержательной. Виды концептуальных моделей. Классификационные признаки разделения моделей

5. Модели и способ представления объекта. Понятия: математическая модель и математическое моделирование

6. Элементы обобщенной математической модели. Признаки классификации математических моделей

7. Отличие простых моделей от сложных. Типы моделей и оператор моделирования

8. Классификация моделей в зависимости от входных и выходных параметров. Deskриптивные и управленческие модели

9. Прямые и обратные модели, цели. Отличие моделей прогноза от оптимизационных моделей

10. Типы содержательной классификации моделей. Обследование объекта моделирования и формулировка технического задания на разработку модели. Формулировка предмодели

11. Концептуальная и математическая постановка задачи моделирования. Объект. Явление. Элемент. Качественный анализ и проверка корректности модели. Контроль

12. Выбор и обоснование выбора методов решения задачи. Поиск решения или реализация алгоритма в виде программ для ПК.

13. Проверка адекватности модели. Практическое использование модели. Дедуктивный и индуктивный подходы к построению модели

14. Корреляционные модели "Структура-свойство, структура-активность"

Вопросы к подготовке (2 часть):

1. Матрица расстояний

2. Матрица смежности
3. Индекс Винера W1
4. Индекс Винера W2
5. Индекс Винера W3 Построить для бутана
6. Индекс Винера без построения матрицы расстояний. Линейный
7. Индекс Винера без построения матрицы расстояний. Циклический
8. Индекс Винера без построения матрицы расстояний. Линейный с циклом
9. Индекс Винера без построения матрицы расстояний. Spiro-циклы
10. Индекс Винера без построения матрицы расстояний. Ветвленный
11. Число полярности
12. Топологический индекс суммы расстояний
13. Индекс Балабана
14. Параметризация индекса Балабана по электроотрицательности
15. Параметризация индекса Балабана по ковалентному радиусу
16. Индекс Балабана для ароматических циклов
17. Индекс Альтенбурга
18. Индекс среднеквадратичных расстояний
19. Индекс Рандича
20. Индекс Кира
21. Индекс Хосойя
22. Индексы на основе чисел Фибоначчи
23. Индекс Наруми
24. Индекс Смоленского

### 8.3. Требования к рейтинг-контролю

Рейтинг контроль:

Успешное усвоение курса - 100 баллов:

1. На экзамен согласно положению о рейтинге ТвГУ выносятся до 40 баллов,
2. Текущий контроль, промежуточная аттестация - до 60 баллов:
  - а) выполнение работ лабораторного практикума -до 20 баллов
  - б) выполнение самостоятельной работы -до 10 баллов максимум
  - в) контрольная работа № 1- до 10 баллов
  - г) контрольная работа № 2 - до 10 баллов
  - д) посещаемость - до 10

## 9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

### 9.1. Рекомендуемая литература

#### 9.1.1. Основная литература

Шифр	Литература
Л1.1	Виноградова, Козлова, Крылов, Корреляции энтальпия образования – топологические индексы в двухатомных спиртах, Тверь, , ISBN: , URL: <a href="http://eprints.tversu.ru/10443/">http://eprints.tversu.ru/10443/</a>
Л1.2	Тагиева, Виноградова, Топологические индексы простых эфиров, Тверь: Тверской государственный университет, , ISBN: , URL: <a href="http://eprints.tversu.ru/8533/">http://eprints.tversu.ru/8533/</a>
Л1.3	Папулов, Федина, Виноградова, Шестивершинные графы и их применение, Тверь: Тверской государственный университет, 2014, ISBN: , URL: <a href="http://eprints.tversu.ru/4139/">http://eprints.tversu.ru/4139/</a>
Л1.4	Нилов Д. Ю., Соколов Д. В., Смоляков В. М., Топологические индексы для расчета свойств алкенов и полиолефинов, , , ISBN: , URL: <a href="http://texts.lib.tversu.ru/texts2/0001189t.pdf">http://texts.lib.tversu.ru/texts2/0001189t.pdf</a>

Л1.5	Соколов Д.В., Нилов Д.Ю., Смоляков В.М., Аддитивные схемы и топологические индексы в прогнозировании свойств полимеров, , , ISBN: , URL: <a href="http://texts.lib.tversu.ru/texts2/0004386t.pdf">http://texts.lib.tversu.ru/texts2/0004386t.pdf</a>
Л1.6	Смоляков В.М., Соколов Д.В., Нилов Д.Ю., Поляков М.Н., Топологические индексы в линейных и нелинейных корреляциях "структура-свойство полимера", , , ISBN: , URL: <a href="http://texts.lib.tversu.ru/texts2/0002884t.pdf">http://texts.lib.tversu.ru/texts2/0002884t.pdf</a>

### 9.1.2. Дополнительная литература

Шифр	Литература
Л2.1	Виноградова, Папулов, Теоретико-графовый подход в изучении корреляций структура-свойство алкинов, Тверь: Тверской государственной университет, 2014, ISBN: , URL: <a href="http://eprints.tversu.ru/4722/">http://eprints.tversu.ru/4722/</a>
Л2.2	Папулов, Учебно-методический комплекс по дисциплине "Математические модели в корреляциях "структура-свойство"", Тверь, 2012, ISBN: , URL: <a href="http://texts.lib.tversu.ru/texts2/04522umk.pdf">http://texts.lib.tversu.ru/texts2/04522umk.pdf</a>

### 9.3.1 Перечень программного обеспечения

1	Kaspersky Endpoint Security 10 для Windows
2	Adobe Acrobat Reader
3	Google Chrome
4	WinDjView
5	OpenOffice
6	Origin 8.1 Sr2

### 9.3.2 Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1	ЭБС «ZNANIUM.COM»
2	ЭБС «ЮРАИТ»
3	ЭБС «Университетская библиотека онлайн»
4	ЭБС IPRbooks
5	ЭБС «Лань»
6	ЭБС BOOK.ru
7	ЭБС ТвГУ
8	Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU (подписка на журналы)
9	Репозиторий ТвГУ
10	Журналы American Institute of Physics (AIP)
11	Журналы American Chemical Society (ACS)
12	БД Scopus
13	БД Web of Science
14	Ресурсы издательства Springer Nature
15	Архивы журналов издательства Oxford University Press
16	Архивы журналов издательства Nature



17	Журналы American Physical Society (APS)
----	---

## 10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Аудит-я	Оборудование
3-243	комплект учебной мебели, компьютеры
5-209	Периодическая система химических элементов Телевизор Компьютер Beng (монитор, системный блок, клав., мышь) МФУ Колонки - 2шт. Вытяжной шкаф -

## 11. МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

### 1. Учебная программа

#### I. Топология и теория графов в расчетах свойств гетеросистем.

Конструирование топологических индексов алканов и молекул, содержащих гетероатом. Корреляционные зависимости «свойство вещества – топологический индекс». Регрессионный анализ зависимостей «свойства вещества – ТИ графа молекулы» двухпараметровыми функциями. Расчет энтальпий образования аминов, силанов с использованием топологических индексов на основе матриц смежности и матриц расстояний химических графов.

II. Корреляции «структура молекулы с гетероатомом – свойство» на основе топологических индексов и КХП матриц смежности молекулярных графов.

Построение аддитивной схемы для молекулы с гетероатомом на основе коэффициентов характеристических полиномов матрицы смежности химических графов. Расчет физико-химических свойств молекулы с гетероатомом с использованием коэффициентов характеристических полиномов квадрата 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 молекулы с гетероатомом с использованием коэффициентов характеристических полиномов матриц смежности химических графов и топологических индексов Винера, Балабана, МТИ, Харари и др.

#### V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

##### 1) Рекомендуемая литература

##### 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>

2. Закгейм, А.Ю. Общая химическая технология: введение в моделирование химико-технологических процессов / А.Ю. Закгейм. – 3-е изд., перераб. и доп. – Москва: Логос, 2012. – 304 с. – (Новая университетская библиотека). – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=84988>

##### б) Дополнительная литература:

1. Белашенко Д.К. Компьютерные методы в физике и физической химии [Электронный ресурс] : лабораторный практикум / Д.К. Белашенко. — Электрон. текстовые данные. — М. : Издательский Дом МИСиС, 2012. — 109 с. — 2227-8397. — Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/56068.html>

2. Хельтье Х. Зиппль В. Молекулярное моделирование: теория и практика: учебное пособие / Х.-. Хельтье, В. Зиппль, Д. Роньян, Г. Фолькерс. — 2-е изд. (эл.). — М.: Лаборатория знаний, 2015. — 322 с. — ISBN 978-5-9963-2401-9. — Текст: электронный // Электронно-библиотечная система «Лань»: [сайт]. — URL: <https://e.lanbook.com/book/66153>

3. Улитин Н.В. Методы моделирования кинетики процессов синтеза и

молекулярно-массовых характеристик полимеров [Электронный ресурс] : монография / Н.В. Улитин, К.А. Терещенко. — Электрон. текстовые данные. — Казань: Казанский национальный исследовательский технологический университет, 2014. — 232 с. — 978-5-7882-1663-8. — Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/62196.html>

2) Программное обеспечение

а) Лицензионное программное обеспечение:

- Microsoft Office
- Microsoft Windows

б) Свободно распространяемое программное обеспечение

- Google Chrome
- MarvinSketch 5.2.4

3) Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

- ЭБС «ZNANIUM.COM» [www.znanium.com](http://www.znanium.com);
- ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <https://biblioclub.ru/>;
- ЭБС «Лань» <http://e.lanbook.com>

4) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

- Электронная образовательная среда ТвГУ <http://lms.tversu.ru>
- Научная библиотека ТвГУ <http://library.tversu.ru>
- Сайт о химии <http://www.xumuk.ru/>
- Сайт разработки программного обеспечения AIMALL <http://aim.tkgristmill.com>
- Сайт химического факультета МГУ <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/phys.html>
- База данных электронного строения <http://aquila.tversu.ru>
- Открытая база данных химических соединений и их термодинамических свойств <https://webbook.nist.gov/>
- База данных спектральных характеристик органических соединений [https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/direct\\_frame\\_top.cgi](https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/direct_frame_top.cgi)