

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич  
Должность: врио ректора  
Дата подписания: 28.09.2023 14:31:05  
Уникальный программный ключ:  
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

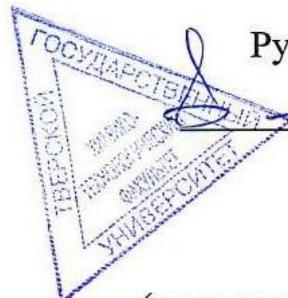
Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

27 июня 2023 г



Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)

## Физико-химические модели

Специальность

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Специализация

Химия функциональных материалов

Для студентов 4 курса очной формы обучения

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

Тверь, 2023

## I. Аннотация

### 1. Цель и задачи дисциплины:

**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.

**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 «Физико-химические модели» входит в Элективные дисциплины 3 Части, формируемой участниками образовательных отношений Блока 1. «Дисциплины» учебного плана.

Требуемый уровень подготовки обучающихся для успешного освоения дисциплины «Физико-химические модели»: *иметь представление* об основных законах физической химии, *знать* математику и физику (в пределах общих курсов, изучаемых химиками).

### 3. Объем дисциплины: 5 зачетных единиц, 180 академических часов, в том числе:

**контактная аудиторная работа:** лекции 28 часов, лабораторные работы 56 часов;  
**самостоятельная работа:** 42 часа, контроль 54 часа.

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

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ПК-1 Способен выбирать и использовать технические средства и методы испытаний для решения исследовательских задач химической направленности, поставленных специалистом более высокой квалификации	ПК-1.1 Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР  ПК-1.2 Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР

	ПК-1.3 Готовит объекты исследования
ПК-2 Способен оказывать информационную поддержку специалистам, осуществляющим научно-исследовательские работы	ПК-2.1 Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных) ПК-2.2 Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)

**5. Форма промежуточной аттестации и семестр прохождения:**  
экзамен в 8-м семестре.

**6. Язык преподавания русский.**

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

	Учебная программа – наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)			Самостоятельная работа (час.)	Контроль
			Лекции	Лабораторные занятия	Контроль самостоятельной работы (в том числе курсовая работа)		
1	Топология и теория графов в расчетах свойств гетеросистем.		10	18	16	20	10
2	Корреляции «структура молекулы с гетероатомом – свойство» на основе топологических индексов и КХП матриц смежности молекулярных графов		12	26	24	27	17
	<b>Итого</b>	<b>180</b>	<b>22</b>	<b>44</b>	<b>40</b>	<b>47</b>	<b>27</b>

**III. Образовательные технологии**

Учебная программа – наименование разделов и тем	Вид занятия	Образовательные технологии
---	-------------	----------------------------

Топология и теория графов в расчетах свойств гетеросистем.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Лекции</li> <li>• Лабораторные занятия</li> <li>• Контроль самостоятельной работы</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• традиционные (фронтальная лекция, проверка домашнего задания)</li> <li>• цифровые (показ презентаций, проведение лабораторных работ,),</li> <li>• групповая работа</li> <li>• модульная работа</li> </ul>
Корреляции «структура молекулы с гетероатомом – свойство» на основе топологических индексов и КХП матриц смежности молекулярных графов	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Лекции</li> <li>• Лабораторные занятия</li> <li>• Контроль самостоятельной работы</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• традиционные (фронтальная лекция, проверка домашнего задания)</li> <li>• цифровые (показ презентаций, проведение лабораторных работ,),</li> <li>• групповая работа</li> <li>• модульная работа</li> </ul>

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

№	Результат (индикатор)	Вид работы / способ	Критерии оценивания
1	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-2.1 ПК-2.2	<b>вид:</b> выполнение работ лабораторного практикума <b>способ:</b> традиционный – решение задач по поиску корреляционных соотношений с регрессионным графиком <b>результаты:</b> углубленная проработка темы  Выполнение лабораторных работ является <i>необходимым, но не достаточным</i> условием получения положительной оценки	<b>20 баллов</b>  Выполнение 1 лабораторной работы – <b>2 балла</b>
2		<b>вид:</b> выполнение самостоятельной работы <b>способ:</b> на компьютере <b>результаты:</b> 1. обзор темы своей научной работы, методики и объектов исследования, представленный в виде презентации	<b>10 баллов</b> – отчет по самостоятельной работе за семестр представлен в виде презентации, оформлен по требованиям, содержит информацию по всем заданиям; <b>8 баллов</b> – отчет по самостоятельной работе за семестр представлен в виде презентации, оформлен по требованиям, содержит информацию более 3/4 от всех заданий;

	2. список патентов по заданной теме, осуществленный по базам данных, оформленный в соответствии с требованиями.  Выполнение самостоятельной работы по индивидуальной теме является <i>необходимым, но не достаточным</i> условием получения положительной оценки	<b>6 баллов</b> – отчет по самостоятельной работе за семестр оформлен не в соответствии с требованиями, содержит информацию более 3/4 от всех заданий; <b>4 балла</b> – отчет по самостоятельной работе за семестр оформлен не в соответствии с требованиями, содержит информацию более 2/4 от всех заданий; <b>2 балла</b> – отчет по самостоятельной работе за семестр не полон (представлено менее 2/4 от всех заданий), не оформлен в соответствии с требованиями; <b>0 баллов</b> – задания не выполнены, отчет не представлен.
3	<b>вид:</b> контрольная работа № 1 контрольная работа № 2 <b>способ:</b> традиционный <b>результаты:</b> оформленные по заданию бумажные бланки с решениями	<b>10 баллов</b> <b>10 баллов</b>
4	Посещаемость	<b>10 баллов</b> (1 балл - 6 академических часов)
	<b>Итого:</b>	<b>60 баллов</b>
<b>МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ</b>		
<p><i>Своевременное выполнение лабораторных, контрольных и самостоятельной работ, посещение занятий и работа на них обучающегося (по итогам текущего контроля успеваемости) позволяют набрать студенту специалитета необходимое количество баллов для положительной оценки. В противном случае на экзамен выносятся невыполненные элементы текущего контроля успеваемости.</i></p>		

### **Шкала оценивания выполнения индикаторов:**

Индикатор считается выполненным, если либо ко времени промежуточной аттестации обучающийся набрал как минимум пороговое количество баллов в результате текущего контроля за те виды активности (самостоятельная, модульные и лабораторные работы), которые отвечают за данный индикатор.

### **Шкала и критерии выставления оценок за дисциплину:**

Шкала и критерии выставления оценок по дисциплине описаны в локальной нормативной документации Тверского государственного университета (Положение о рейтинговой системе обучения студентов ТвГУ). Положительная оценка может быть выставлена только в том случае, если выполнены все индикаторы.

## 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. Белащенко Д.К. Компьютерные методы в физике и физической химии [Электронный ресурс] : лабораторный практикум / Д.К. Белащенко. — 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 профессиональный плюс 2013
- Microsoft Windows 10 Enterprise

#### б) Свободно распространяемое программное обеспечение

- Google Chrome
- ISIS Draw 2.4 Standalone
- 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://sdfs.db.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/direct\\_frame\\_top.cgi](https://sdfs.db.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi)

## VI. 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.

### 2. Методические указания по подготовке к выполнению лабораторных работ

При построении курса на передний план выступает не сумма знаний (количество передаваемой информации), а сама *концепция предмета, его внутренняя логика, связь между разделами* и др.

На лабораторных занятиях разбираются *ключевые* (узловые) вопросы предмета, причем нужно добиваться их глубокого знания и понимания. Важно практиковать *активные формы обучения* (деловые и инновационные игры, дискуссии, тренинг, мозговая атака и т.д.), широкое использование ЭВМ (например, методы компьютерной графики) и других технических средств (молекулярные модели, видеозаписи лекций преподавателя и т.п.). Полезно затрагивать крупнейшие достижения в данной области, еще не вошедшие в монографии и учебники (принцип опережающего обучения).

На лабораторных занятиях время от времени проводятся также небольшие контрольные работы (из 3-4 вопросов) по закреплению лекционного материала. Результаты работ учитываются при рейтинг-контроле.

### **3. Темы лабораторных работ.**

1. Конструирование топологических индексов алканов и молекул, содержащих гетероатом.
2. Корреляционные зависимости «свойство вещества – топологический индекс».
3. Расчет энтальпий образования аминов, силанов с использованием топологических индексов матриц смежности химических графов.
4. Регрессионный анализ зависимостей «свойства вещества – ТИ графа молекулы» двухпараметровыми функциями.
5. Расчет энтальпий образования алканов с использованием топологических индексов на основе матриц смежности и матриц расстояний химических графов.
6. Построение аддитивной схемы для молекулы с гетероатомом на основе коэффициентов характеристических полиномов матрицы смежности химических графов.
7. Расчет физико-химических свойств молекулы с гетероатомом с использованием коэффициентов характеристических полиномов квадрата матрицы смежности химических графов.
8. Расчет энтальпий образования аминов и радикалов с использованием коэффициентов характеристических полиномов матрицы смежности химических графов.
9. Расчет энтальпий образования свободных радикалов по аддитивной схеме, с учетом ближайшего окружения атомов.
10. Расчет энтальпий образования свободных радикалов по аддитивной схеме в третьем приближении.
11. Расчет энтальпий образования молекулы с гетероатомом с использованием коэффициентов характеристических полиномов матриц смежности химических графов и топологических индексов Винера, Балабана, МТИ, Харари и др.

### **4. Методические рекомендации по организации самостоятельной работы**

Естественно, не все вопросы учебной программы включаются в лекции и лабораторные работы. Некоторые из них выносятся на самостоятельную

работу такого рода – студент готовит небольшой реферат по заданной теме и нередко выступает с ним перед аудиторией.

Самостоятельное изучение дисциплины целесообразно начинать, ознакомившись с программой дисциплины и требованиями к минимуму содержания, знаниям и умениям по данной дисциплине.

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.

### **5. 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).

Расчет и эксперимент (сопоставление данных).

### **6. Вопросы для самоподготовки к контрольным работам**

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  $D_f H^0_{298 (г)}$  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  $D_f H^0_{298 (г)}$  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.

13. Понятие QSAR (Quantity Structure Activity Relationship)

14. Характеристики биологической активности соединений, используемые в QSAR.

15. Классификация дескрипторов.

16. Понятие молекулярных графов.

17. Дескрипторы структурной формулы. Понятие топологических индексов, индексы Рандича, Кира-Холла, Винера и др.

18. Кодирование структурных формул с помощью линейных номенклатур.

19. Дескрипторы электронной структуры молекул (заряды на атомах, электроотрицательность, квантово-химические дескриптора НОМО, LUMO)/

20. Дескрипторы молекулярной формы. Индексы Кира.

21. Константа Гаммета, константы Тафта.

22. Липофильность. Коэффициент распределения в системе октанол-воды как характеристика липофильности,  $\log P$ .

23. Описание стерических эффектов. STERIMOL.

24. Описание электростатических взаимодействий.

25. Описание способности соединений к образованию водородных связей.

26. Индикаторные дескрипторы.

27. Метод Ганча.

28. Метод Фри-Вильсона.

29. 3D QSAR. Метод сравнительного анализа молекулярного поля (CoMFA).

30. Статистические методы, применяемые в QSAR. Коэффициент корреляции, стандартное отклонение, критерий Фишера.

Множественная линейная регрессия. Пошаговая регрессия.

31. Искусственные нейронные сети. Использование искусственных нейронных сетей в QSAR.

## **7. 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 не-валентные 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.

### ***Пример экзаменационного билета***

#### **«Физико-химические модели»**

##### **Билет №**

1. Топологический индекс Балабана для углеводородов. Учет гетероатомов.
2. Топологический индекс Хосойя. Графический метод
3. Рассчитайте комбинаторным методом индекс Хосойя для 2,2,4-триметил,3-этилпентана

## **8. Указания для обучающихся по самостоятельной работе.**

Организуя свою учебную работу студенты должны, во-первых, выявить рекомендуемый режим и характер учебной работы по изучению теоретического курса, применению изученного материала в лабораторных работах, по выполнению заданий для самостоятельной работы, по использованию информационных технологий и т.д. Во-вторых, ознакомиться с указанным в методическом материале по дисциплине перечнем учебно-методических изданий, рекомендуемых студентам для подготовки к занятиям

и выполнению самостоятельной работы, а также с методическими материалами на бумажных и/или электронных носителях, предоставляемых студентам преподавателем во время занятий.

Самостоятельная работа обучающихся, предусмотренная учебным планом, должна соответствовать более глубокому усвоению изучаемого курса, формировать навыки исследовательской работы и ориентировать студентов на умение применять теоретические знания на практике.

### **Подготовка отчета по объекту самостоятельной работы**

Оформление отчета происходит на русском языке. Каждая тема самостоятельной работы раскрыта и описана на отдельном листке формата А4, со всеми полями 2 см. шрифтом TNR, кегль 12, с одиночным интервалом между строками. Вверху, справа фамилия, имя и группа обучающегося.

### **Подготовка презентации по объекту самостоятельной работы**

*Структура презентации.*

Структура презентации должна соответствовать структуре разрабатываемой темы:

1. Титульный слайд (1 слайд).

Первый лист – это титульный лист, на котором обязательно должны быть представлены: название темы; план презентации (вопросы, раскрывающие тему)

2. Слайды, раскрывающие тему (9 - 10 слайдов).

Следующими слайдами должно быть содержание, где представлены основные вопросы темы. Желательно, чтобы из содержания по гиперссылке можно перейти на необходимую страницу и вернуться вновь на содержание.

3. Финальный слайд (1 слайд).

На последнем слайде должны быть выводы о проделанной работе, так же фамилия, имя, отчество студента, группа; должность, фамилия, имя, отчество преподавателя

Рекомендуемое общее количество слайдов – 10 - 12

### **Этапы подготовки презентации**

Создание презентации состоит из следующих этапов:

***I. Планирование презентации*** – это многошаговая процедура, включающая определение целей, изучение темы, формирование структуры и логики подачи материала. Планирование презентации включает в себя два основных этапа:

#### **1 – Формирование материала на русском языке**

Он включает в себя самую кропотливую работу с материалом и подразделяется на:

- Определение целей.
- Сбор информации о материале.
- Определение основной идеи презентации.
- Подбор дополнительной информации.
- Планирование презентации.

→ Подготовка заключения.

## 2 – Формирование презентации на английском языке

На данном этапе требуется внимательная работа по переводу материалов на английский язык

**II. Разработка презентации** – методологические особенности подготовки слайдов презентации, включая вертикальную и горизонтальную логику, содержание и соотношение текстовой и графической информации.

**III. Репетиция презентации** – это проверка и отладка созданной презентации. Она проводится на русском языке

## **9. Подготовка к выполнению и темы курсовых работ. Требования и рекомендации к курсовой работе по дисциплине.**

Студенты специалитета в течении семестра выполняют курсовую работу по дисциплине «Физико-химические модели» и работают над её оформлением. В основу курсовых работ положено самостоятельное выполнение проекта по теоретической химии. Подбор методики осуществляется с помощью преподавателя курса, подбор литературы проводится самостоятельно.

### ***Примерные темы курсовых работ:***

1. Применение теории графов для расчета свойств замещённых глицина
2. Математическое моделирование в исследовании ряда сложных эфиров
3. Топологический подход в изучении свойств ряда сульфоксидов
4. Топологические индексы и их использование для изучения свойств циклопарафинов

### ***Методические рекомендации по написанию курсовой работы***

#### **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 знания и навыки работы в области теоретической химии для научного исследования;
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;

**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 выполнении проекта в области квантовой химии и 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 по дисциплине «Дополнительные главы квантовой химии» можно выбрать из примерного перечня тем. 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 принята к оценке.

**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 физической 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 выбора темы курсовой работы, необходимо пройти консультацию по теме с научным руководителем. В ходе консультации происходит уточнение тематики работы, согласование плана курсовой работы и разбор возникших вопросов по теме. 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 согласовать его 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 (*данный пункт не является обязательным*).

## **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 порядке использования материала источника в курсовой.

#### **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 составлении 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 резюмирующие 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 – Times New Roman размером 14 пт., междустрочный интервал – полуторный, выравнивание текста на странице – по ширине. Абзацный отступ 1,25 см. 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 не более 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 (подрисуночный 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 неорганической и аналитической 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 недопущенную работу также научным руководителем составляется рецензия, в которой отражаются те недостатки, которые необходимо устранить.

#### **5.1.2. Примерные критерии оценки курсовой работы**

В курсовой работе студент должен показать:

- профессиональную эрудированность, знание общей и специальной литературы;
- умение планировать и проводить исследование;
- способность видеть взаимосвязь проблем и вопросов теории и практики;
- умение сопоставлять и анализировать научные подходы и идеи;
- умение логично и стройно излагать материал в соответствии с планом;
- умение делать выводы и обобщения;
- умение объяснить и защитить положения работы.

Общими требованиями к курсовой работе и первичными критериями качества её выполнения являются:

- логичность в изложении материала при раскрытии темы;
- обоснованность (социальная и научная) актуальности темы и точность постановки проблемы исследования;
- конкретность целей и задач исследования, принципиальная возможность их достижения и решения в ходе работы;
- полнота изложения вопросов плана;

- привлечение достаточно широкого круга учебной и научной литературы и, в первую очередь, первоисточников;
- самостоятельность и доказательность выводов и предложений, которые содержатся в соответствующих разделах работы и заключении;
- грамотность написания, правильность и аккуратность оформления.

**«Отлично»** выставляется в том случае, если работа выполнена без замечаний и в ней присутствует большая доля самостоятельных авторских выводов и предложений. Студент в процессе защиты хорошо владеет содержанием проведенного исследования, смог ответить на все поставленные вопросы, входящие в предмет исследования курсовой работы, смог в должном образе аргументировать свои выводы, опираясь на проанализированные источники и литературу.

**«Хорошо»** выставляется в том случае, если тема курсовой раскрыта полностью, но имеются замечания по оформлению курсовой или студент в процессе защиты не смог ответить на все поставленные вопросы, входящие в предмет исследования курсовой работы.

**«Удовлетворительно»** выставляется в том случае, если тема курсовой раскрыта не полностью, имеются замечания по оформлению, студент в процессе защиты не смог ответить на все поставленные вопросы, входящие в предмет исследования курсовой работы, плохо ориентировался в теме.

**«Неудовлетворительно»** выставляется в том случае, если работа не соответствует предъявляемым требованиям.

## VIII. Материально-техническое обеспечение

### Для аудиторной работы

Аудитория кафедры физической химии. № 408, 170002, Тверская обл., г. Тверь, пер. Садовый, д. 35	Столы, стулья, доска учебная, стационарный мультимедийный проектор, стационарный экран УФ-спектрометр Specord-VIS M40, ИК-спектрометр Specord-M75, лабораторный фотоэлектрический абсорциометр-нефелометр ЛМФ-69, рефрактометр ИРФ-454 Б2М, ареометры, спектрофотометр ПромЭкоЛаб ПЭ-5400В, анализатор вольтамперометрический АКВ-07МК, магнитные мешалки, лабораторный кондуктометр Анион 4120, весы аналитические лабораторные ВЛ-120 и ВК-600, весы технические лабораторные ВЛТЭ-1100, дистиллятор UD-1100, сушильный шкаф, вытяжной шкаф, потенциометр постоянного тока, барометр анероид, электрическая плитка, рН-метры 410, стационарный мутнометр НАСН 2100NIS, лабораторные столы, лабораторная химическая посуда, реактивы MS Office 365 pro plus – Акт приема-передачи № 369 от 21 июля 2017
Аудитория для лекционных, семинарских занятий, консультаций и самостоятельной работы № 209,	Столы, стулья, кафедра, доска MS Office 365 pro plus – Акт приема-передачи № 369 от 21 июля 2017

170002, Тверская обл., г. Тверь, просп. Чайковского, д. 70	
--	--

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

№п.п.	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Реквизиты документа, утвердившего изменения
1.	Раздел I Аннотация.	Измены 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.	Раздел V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	Дополнен список основной и дополнительной литературы	Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-технологического факультета