

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ФИО: Смирнов Сергей Николаевич

Должность: врио ректора

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Дата подписания: 16.09.2022 15:38:33

Уникальный программный ключ:

69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

28 апреля 2021 г.



Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)

Физико-химические расчеты

Направление подготовки

04.03.01 Химия

Направленность (профиль)

Перспективные материалы: синтез и анализ

Для студентов 3 курса очной формы обучения

Составители: к.х.н., доцент Белоцерковец Н.И. _____

к.х.н., Русакова Н.П. _____

Тверь, 2021

I. Аннотация

1. Цель и задачи дисциплины:

Цель освоения дисциплины - овладение методами математической обработки числовых данных физико-химических измерений и углубленное изучение основных принципов феноменологической теории и ее применение при решении задач расчета и прогнозирования физико-химических свойств веществ, необходимых для практики и не изученных экспериментально.

Задачи:

- освоить основные методы первичной статистической обработки числовых данных физико-химических измерений;
- уметь строить аддитивные схемы и применять их при расчетах физико-химических свойств веществ;
- использовать построенные аддитивные схемы для прогнозирования физико-химических свойств веществ

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Физико-химические расчеты» входит в Элективные дисциплины 6 Части, формируемой участниками образовательных отношений Блока 1. «Дисциплины» учебного плана.

Требуемый уровень подготовки обучающихся для успешного освоения дисциплины: *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 - 52 часа, лабораторные работы - 70 часов;

самостоятельная работа: 31 час, контроль - 27 часов.

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:

зачет в 5-м семестре,
экзамен в 6-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, в т.ч. контроль (час.)
			Лекции	Лабораторные занятия	
Семестр 5					
1	Математические основы работы с числовыми данными	8	2	4	2
2	Основы статистической обработки результатов эксперимента	33	14	14	5
3	Погрешности измерений	42	18	16	8
Итого в семестре:		83	34	34	15
Семестр 6					
4	Схемы расчета свойств в ряду изомеров замещения базисного соединения	31	8	16	7
5	Корреляции «структура – свойство алкана» на основе топологических индексов матрицы расстояний	23	6	12	5
6	Корреляции «структура–свойство» веществ на основе топологических индексов матрицы смежности	16	4	8	4
7	Контроль	27	0	0	27
Итого в семестре:		97	18	36	43
ВСЕГО		180	52	70	58

III. Образовательные технологии

Учебная программа – наименование разделов и тем (в строгом соответствии с разделом II РПД)	Вид занятия	Образовательные технологии
5 семестр		
1. Математические основы работы с числовыми данными	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа • решение задач и упражнений • составление отчета • проверка выполнения заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • презентации • компьютерный эксперимент • работа с текстом • конспект
2. Основы статистической обработки результатов эксперимента	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа • решение задач и упражнений • составление отчета • проверка выполнения заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • компьютерный эксперимент • работа с текстом • конспект
3. Погрешности измерений	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • лабораторная работа • решение задач и упражнений • составление отчета • проверка выполнения заданий 	<ul style="list-style-type: none"> • лекция • компьютерный эксперимент • работа с текстом • конспект
6 семестр		
4. Схемы расчета свойств в ряду изомеров замещения базисного соединения	<ul style="list-style-type: none"> • лекции • лабораторные работы • распределение заданий для самостоятельной работы • проверка домашнего задания 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (краткий обзор темы, решение упражнений), • информационные (просмотр презентаций) • групповая работа,
5. Корреляции «структура – свойство алкана» на основе топологических индексов матрицы расстояний	<ul style="list-style-type: none"> • лекции • лабораторные работы • распределение заданий для самостоятельной работы • проверка домашнего задания • модульная работа 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (краткий обзор темы, решение упражнений), • информационные (просмотр презентаций) • групповая работа,
6. Корреляции «структура– свойство» веществ на основе топологических индексов матрицы смежности	<ul style="list-style-type: none"> • лекции • лабораторные работы • распределение заданий для самостоятельной работы • проверка домашнего задания • модульная работа 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (краткий обзор темы, решение упражнений), • информационные (просмотр презентаций) • групповая работа,

7. Контроль	<ul style="list-style-type: none"> • консультативное занятие • экзамен 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционный (обзор и решение проблемных вопросов) • групповая работа
-------------	--	--

IV. Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации

5 СЕМЕСТР

Вопросы и задания для проведения текущей аттестации

РЕКОМЕНДАЦИИ К ВЫПОЛНЕНИЮ ЗАДАНИЙ

При выполнении задания необходимо следовать методическим указаниям к работе.

1. Внимательно прочитать указания к работе
2. Работать самостоятельно
3. Создать файл «ФИО-Работа №_»
4. Указать: дату, ФИО, тему занятия, вопросы
5. Последовательно ответить на все вопросы, обязательно пользуясь текстом учебного пособия. При этом основное внимание следует уделить:
 - Осмыслению терминов и понятий по теме занятия
 - Основным закономерностям вычислений
 - Последовательности действий при расчетах
 - Расчетным формулам (*расшифровать обозначения, указать единицы измерения*)
 - Условиям и ограничениям в использовании расчетных методов
6. Файл отчета отредактировать
7. Замечания преподавателя не удалять, исправления ошибок сделать под заголовком «Доработка».

Задание 1.

ОБЩИЕ ПРАВИЛА МАТЕМАТИЧЕСКИХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

1. Что такое «Значащие цифры» и как что они значат?
2. Перечислить правила округления чисел.
3. Перечислить правила записи окончательного результата измерения в стандартной форме.

Задание 2.

ПОГРЕШНОСТИ ИЗМЕРЕНИЙ

1. Что такое погрешность измерения? Как ее оценивают?
2. Чем абсолютная погрешность отличается от относительной?
3. Чем характеризуют качество измерения?
4. Каковы причины появления промахов ?
5. Что такое систематическая погрешность?
6. Какова роль модельных несоответствий в развитии науки?

7. Что такое случайная погрешность? Какие причины приводят к ее появлению?

8. Перечислить возможные источники погрешностей измерений.

Задание 3.

СЛУЧАЙНЫЕ ПОГРЕШНОСТИ

1. Основные термины, обозначения и формулы расчета (*Среднее значение; дисперсия; Среднее квадратичное отклонение; доверительный интервал, доверительная вероятность, коэффициент Стьюдента*)
2. Правила расчета среднего квадратичного отклонения

Задание 4.

ЗАКОНЫ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ СЛУЧАЙНЫХ ВЕЛИЧИН

1. Как можно графически представить статистическое закон нормального распределения случайных величин (гистограмму) – что рассчитывают, что откладывают по осям графика?
2. Что такое генеральная совокупность случайных величин? Что такое случайная выборка результатов?
3. Чем характеризуется кривая нормального распределения (кривая Гаусса)?
4. Как характеризуется кривая стандартного нормального распределения случайных величин? Что характеризует нормированная функция Лапласа?
5. Доверительная вероятность, уровень значимости и их рекомендуемые значения.
6. Как зависит погрешность результата от числа измерений?
7. Метод малых выборок (основания, возможности и условия применения). Распределение Стьюдента (t-распределение). Степень свободы (f).

Задание 5.

ИСКЛЮЧЕНИЕ ГРУБЫХ ОШИБОК: ПРАВИЛО ТРЕХ СИГМ

1. Какие погрешности называют грубыми? Что делают с такими погрешностями при их обнаружении?
2. Сформулировать правило трех сигм для исключения грубых ошибок.
3. Какой смысл имеет величина сигма?
4. Какой закон распределения плотности случайной величины характеризует правило трех сигм?
5. Какой процент случайных величин попадает в интервал ± 3 сигма?

Задание 6.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОСТОЯННОЙ СИСТЕМАТИЧЕСКОЙ ОШИБКИ

1. По каким критериям определяют одновременно наличие постоянной и переменной систематической ошибки?. Какие значения могут иметь эти критерии в случае наличия систематических ошибок?
2. Описать условия применимости метода проверки наличия систематической ошибки по текущим анализам

3. Как определить по текущим анализам наличие постоянной систематической ошибки? Указать последовательность действий и правила расчета.
4. По данным ПРИМЕРА оценить наличие постоянной систематической ошибки в приведенных результатах измерения.

Задание 7.

ОБЩИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ СЛОЖЕНИЯ ОШИБОК

1. Математическое выражение для суммарной ошибки;
2. Четыре вида уравнений для расчета суммарной ошибки.
3. Когда для расчета суммарной ошибки используют *абсолютные* ошибки, а когда *относительные*?

Задание 8.

ОСОБЕННОСТИ СЛОЖЕНИЯ ОШИБОК ПРИ АНАЛИТИЧЕСКИХ ОПЕРАЦИЯХ

1. Как определить ошибку *взвешивания*?
2. Условия уменьшения ошибки гравиметрического метода
3. Как определяется *ошибка при делении пробы (разбавлении)* в объемном анализе?
4. Расчет *ошибки определения титра* раствора и способы ее уменьшения.

Задание 9.

ПЕРЕМЕННАЯ СИСТЕМАТИЧЕСКАЯ ОШИБКА

1. По каким критериям определяют наличие *переменной* систематической ошибки в методе одновременного их определения? Какие значения могут иметь эти критерии в случае наличия систематических ошибок?
2. Как определить по текущим анализам наличие *переменной* систематической ошибки? Указать последовательность действий и правила расчета.
3. По данным ПРИМЕРА оценить наличие *переменной* систематической ошибки в приведенных результатах измерения.

Рекомендации для выполнения контрольных работ

Для своего ВАРИАНТА экспериментальных данных произвести все необходимые действия и расчеты для определения доверительного интервала значений измеренной величины для заданной доверительной вероятности.

Рекомендуется:

- 1) *составить последовательность расчетов*
- 2) *результаты сразу оформлять в таблицу*
- 3) *приводить формулы и подставлять в них числа промежуточных расчетов*
- 4) *Не забыть округлить результат до правильной значащей цифры.*

Контрольная работа 1.

Рассчитать среднюю квадратичную ошибку S измерений и оценку доверительных границ ε для доверительной вероятности $p=0.95$.

Контрольная работа 2.

Для своего ВАРИАНТА данных проверить наличие грубых ошибок измерения по методу t -значений (для доверительной вероятности 0.90)

Контрольная работа 3.

Выписать порядок проведения расчетов определения грубых ошибок по методу $4\bar{D}$ значений

Для своего ВАРИАНТА данных проверить наличие грубых ошибок измерения по методу $4\bar{D}$ значений.

Контрольная работа 4.

Составить порядок проведения расчетов для исключения грубых ошибок в результатах измерений с помощью Q -критерия.

Для своего ВАРИАНТА данных проверить наличие грубых ошибок с помощью Q -критерия.

Типовые контрольные задания для промежуточного контроля

Результат (индикатор)	Формулировка задания	Вид работы / способ	Критерии оценивания
ПК-1.1	<p><i>Задание 1. Составить план проведения расчета доверительного интервала значений измеряемой величины с использованием одной из стандартных компьютерных программ.</i></p> <p><i>Задание 2. Составить алгоритм действий для расчета среднеквадратичного отклонения значений измеряемой величины.</i></p>	Творческое задание/Письменная работа	<p>Имеется полное верное решение, включающее правильный ответ – 3 балла;</p> <p>Дано верное решение, но допущены не существенные фактические ошибки, не искажающие общего смысла – 2 балла;</p> <p>Имеется верное решение только части задания – 1 балл.</p>
ПК-1.2	<p><i>Задание 1. Определить наличие грубых ошибок в результатах измерений физико-химического свойства вещества по методу трех сигм.</i></p> <p><i>Задание 2. Определить доверительный интервал значений измеряемой величины с помощью программы Origin</i></p> <p><i>Задание 3. Произвести расчет среднеквадратичного отклонения результатов аналитического</i></p>	Письменная работа	<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.</p>

	определения содержания основного вещества в исследуемом образце с использованием одной из стандартных компьютерных программ.		
ПК-1.3	<p><i>Задание 1.</i> Серию результатов измерений физической величины представить в таблице статистического распределения относительных частот .</p> <p><i>Задание 2.</i> С помощью программы Excel рассчитать среднеквадратичное отклонение и доверительный интервал значений для заданного статистического распределения результатов измерений физической величины.</p>	Письменная работа	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.
ПК-2.1 ПК-2.2	<p><i>Задание 1.</i> По литературным данным определить наличие грубых ошибок в серии аналитических измерений.</p> <p><i>Задание 2.</i> С помощью стандартных компьютерных программ провести первичную статистическую обработку серии литературных экспериментальных данных и представить результаты в стандартной форме.</p> <p><i>Задание 3.</i> С помощью программы Excel рассчитать среднеквадратичное отклонение опубликованных результатов измерений физико-химического свойства вещества.</p>	Творческое задание/Письменная работа	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.

**Критерии оценки освоения компетенций бакалаврами по дисциплине
«Физико-химические расчеты»
6 СЕМЕСТР**

№	Результат (индикатор)	Вид работы / способ	Критерии оценивания
1	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-2.1 ПК-2.2	вид: решение задач в рамках лабораторных занятий по темам-4-6 способ: традиционный результаты: углубленная проработка темы	30 баллов Активная работа на занятии – решение у доски 2 балла

		Выполнение лабораторных работ является <i>необходимым, но не достаточным</i> условием получения положительной оценки	
2		<p>вид: выполнение самостоятельной работы</p> <p>способ: на компьютере</p> <p>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.</p> <p>Выполнение самостоятельной работы по индивидуальной теме является <i>необходимым, но не достаточным</i> условием получения положительной оценки</p>	<p>5 баллов – отчет по самостоятельной работе за семестр представлен в виде презентации, оформлен по требованиям, содержит информацию по всем заданиям; 4 балла – отчет по самостоятельной работе за семестр представлен в виде презентации, оформлен по требованиям, содержит информацию более 3/4 от всех заданий; 3 балла – отчет по самостоятельной работе за семестр оформлен не в соответствии с требованиями, содержит информацию более 3/4 от всех заданий; 2 балла – отчет по самостоятельной работе за семестр оформлен не в соответствии с требованиями, содержит информацию более 2/4 от всех заданий; 1 балл – отчет по самостоятельной работе за семестр не полон (представлено менее 2/4 от всех заданий), не оформлен в соответствии с требованиями; 0 баллов – задания не выполнены, отчет не представлен.</p>
3		<p>вид: контрольная модульная работа № 1 контрольная модульная работа № 2</p> <p>способ: традиционный</p> <p>результаты: оформленные по заданию бумажные бланки с решениями</p>	<p>10 баллов 10 баллов</p>
4		Посещаемость	0,5 – 1 занятие (3 академических часа)
5		Итого:	60 баллов на семестр
6		Экзамен	40 баллов
		Всего	100 баллов

МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Своевременное выполнение лабораторных, контрольных и самостоятельной работ, посещение занятий и работа на них обучающегося (по итогам текущего контроля успеваемости) позволяют набрать студенту бакалавриата необходимое количество баллов для положительной оценки. В противном случае на экзамен выносятся невыполненные элементы текущего контроля успеваемости.

Учебная программа 6 семестр

I. СХЕМЫ РАСЧЁТА СВОЙСТВ В РЯДУ ИЗОМЕРОВ ЗАМЕЩЕНИЯ БАЗИСНОГО СОЕДИНЕНИЯ

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

II. КОРРЕЛЯЦИИ «СТРУКТУРА – СВОЙСТВО АЛКАНА» НА ОСНОВЕ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИНДЕКСОВ МАТРИЦЫ РАССТОЯНИЙ

Топологические индексы на основе матрицы смежности и матрицы расстояний.

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

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

III. КОРРЕЛЯЦИИ «СТРУКТУРА– СВОЙСТВО» ВЕЩЕСТВ НА ОСНОВЕ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИНДЕКСОВ МАТРИЦЫ СМЕЖНОСТИ

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

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

V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

1) Рекомендуемая литература

а) Основная литература:

1. *Александрова Т.П.* Физико-химические методы анализа [Электронный ресурс]: учебное пособие/ Александрова Т.П., Апарнев А.И., Казакова А.А.— Электрон. текстовые данные.— Новосибирск: Новосибирский государственный технический университет, 2014.— 90 с.— Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/44699>.

2. *Венер М.В.* Строение молекул и основы квантовой химии [Электронный ресурс]: учебное пособие. – М.: Московский городской педагогический университет, 2010. - 90 с. – Электронный ресурс. – Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/26626.html>

б) Дополнительная литература:

1. Физические методы исследования и их практическое применение в химическом анализе [Электронный ресурс]: учебное пособие/ Н.Г. Ярышев [и др.].— Электрон. текстовые данные.— М.: Прометей, 2012.— 159 с.— Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/18633>

2. Денисов В. Я. Стереохимия органических соединений. - Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2013. - 228 с. <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232336>

2) Программное обеспечение

а) Лицензионное программное обеспечение:

- Microsoft Office профессиональный плюс 2013
- Microsoft Windows 10 Enterprise
- HyperChem

б) Свободно распространяемое программное обеспечение

Google Chrome
Origin 8.1 Sr2
ISISDraw

3) Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

- ЭБС «ZNANIUM.COM» 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

- Научная библиотека ТвГУ (<http://library.tversu.ru>)
- ЭБС «Университетская библиотека онлайн» (договор № 158/08 от 10.11.2014) (<http://www.iprbookshop.ru/>)

- Научная электронная библиотека (договор №SU-14-08/2014 от 14.10.2014) (<https://elibrary.ru/>)
- <http://ru.wikipedia.org/wiki/>
- <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/>

VI. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины

Методические указания к лабораторным работам

На лабораторных занятиях разбираются *ключевые* (узловые) вопросы предмета с целью более глубокого их понимания. Практикуется широкое использование ПК (например, методы компьютерной графики) и других технических средств (молекулярные модели, видеозаписи лекций преподавателя и т.п.). Проводятся также небольшие работы по закреплению лекционного материала. Результаты работ учитываются при рейтинг-контроле.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы

Самостоятельная работа проводится с целью углубления и закрепления полученных в ходе лекционных занятий знаний и приобретение навыков пользования рекомендованной литературой, навыков научного исследования.

Самостоятельная работа начинается с работы над лекционным материалом. Она включает конспектирование лекций и последующую работу с учебником. При работе над текстом лекции студенту следует обратить особое внимание на основные понятия изучаемой темы, а так же на указания и рекомендации преподавателя по выполнению задания.

Перечень основных понятий, изучение которых предусмотрено данной дисциплиной

Вычислительная математика
 Вычислительные методы в физике и химии
 Математическая модель
 Математическое моделирование
 Взаимодействия атомов
 Валентные и невалентные взаимодействия
 Изомерия. Виды изомерии
 Энтальпия образования. Энтропия. Энергии Гиббса. Теплота испарения
 Численные расчеты
 Расчетные схемы. Взаимосвязь между различными расчетными схемами
 Метод наименьших квадратов (МНК)

Рекомендации для подготовки к зачету

(5 семестр)

Дисциплина «Физико-химические расчеты» изучается в 5-м и 6-м семестрах. В 5 семестре учебным планом предусмотрен зачет.

Вопросы для подготовки к зачету

1. Математические основы работы с числовыми данными химического эксперимента. Значащие цифры, правила округления.
2. Физические величины, точность и результаты их измерения.
3. Статистическое распределение (ряд) результатов и его графическое представление. Гистограммы. Типы статистических распределений.
4. Порядок проведения первичной статистической обработки экспериментальных данных и представления окончательных результатов в стандартной форме. Доверительный интервал значений
5. Классификация погрешностей измерения. Систематические и случайные погрешности. Приборные погрешности.
6. Методы оценки грубых погрешностей измерения (правило трех сигма и др.)
7. Суммарная погрешность. Правила сложения ошибок в химическом анализе.

Рекомендации для подготовки к экзамену (6 семестр)

Дисциплина «Физико-химические расчеты» изучается в 5-м и 6-м семестрах. В 5 семестре учебным планом предусмотрен зачет, в 6 семестре экзамен. Экзамен включают в себя 1) устные ответы на вопросы, 2) результаты рейтинг-контроля

При ответах на вопросы принимается во внимание знание и понимание по существу материала, его полнота и глубина освещения, аргументированность, культура речи и пр. При ответе следует четко давать определения понятий, дополнять каждый теоретический вопрос соответствующими примерами.

В ходе экзамена преподаватель имеет право задавать дополнительные вопросы.

Вопросы к итоговому экзамену по дисциплине

1. Математическая модель.
2. Математическое моделирование.
3. Методы решения задачи, к которой приводит математическая модель. Общая погрешность решения задачи.
4. Вычислительные методы в физике и химии.
5. Численные методы.

6. Молекула как система взаимодействующих атомов. Валентные и невалентные взаимодействия.
7. Атом-атомное представление (общая математическая модель).
8. Принципы построения расчетных схем.
9. Схемы расчета свойств замещенных этана и его аналогов.
10. Схемы расчета свойств замещенных этилена.
11. Схемы расчета свойств замещенных бензола.
12. Схемы расчета свойств замещенных циклопропана.
13. Взаимосвязь между различными расчетными схемами.
14. Предсказательные возможности феноменологической теории.
15. Численные расчеты термодинамические свойства веществ (энтальпии образования, энтропии, энергии Гиббса, теплоты испарения).
16. Адекватность математической модели. Сопоставление результатов расчета с экспериментом.
17. Подсчитать число валентных и невалентных взаимодействий в молекулах этана и пропана (в шахматных конформациях).
18. Подсчитать число валентных и невалентных взаимодействий в молекулах этилена и бензола.
19. Подсчитать число валентных и невалентных взаимодействий в молекулах циклопропана и циклобутана (в последнем случае – для плоского 1. Определение параметров (в кДж/моль) МНК дает для энтальпий образования $\Delta_f H^0_{298(T)}$ X-замещенных метана при X = D, T, F, Cl:

$$\Delta_f H^0_{\text{CH}_4-l\text{D}_l} = -74,829 - 4,409 l + 0,094 l^2 \quad (l = 0, 1, 2, 3, 4);$$

$$\Delta_f H^0_{\text{CH}_4-l\text{T}_l} = -74,897 - 3,851 l + 0,086 l^2 \quad (l = 0, 1, 2, 3, 4);$$

$$\Delta_f H^0_{\text{CH}_4-l\text{F}_l} = -73,38 - 170,76 l - 11,28 l^2 \quad (l = 0, 1, 2, 3, 4);$$

$$\Delta_f H^0_{\text{CH}_4-l\text{Cl}_l} = -72,56 - 16,12 l + 2,46 l^2 \quad (l = 0, 1, 2, 3, 4).$$
- Рассчитать величины $\Delta_f H^0_{298(T)}$ дейтеро-, тритий-, фтор-, хлорзамещенных метана. Сопоставить результаты расчета с экспериментом.
22. Составить схемы расчёта свойств X-замещённых этана (в шахматных конформациях) при учете парных взаимодействий атомов. Провести численные расчеты энтальпий образования.
23. Составить схемы расчёта свойств X-замещённых бензола при учете парных взаимодействий атомов. Провести численные расчеты энтальпии образования.

Виды рейтинг-контроля

Рейтинг-контроль по данной дисциплине проводится в течение каждого семестра в соответствии с действующим Положением о рейтинговом контроле. Рейтинг-контроль состоит из двух модулей и итогового контроля (5 семестр – зачет; 6 семестр – экзамен). Каждый модуль включает в себя результаты текущей работы во время аудиторных занятий и контрольную (письменную) работу. Практикуются также рефераты и/или презентации. Учитывается посещение занятий.

Семестр 5 (всего 100 баллов)

Рейтинг-контроль проводится по результатам текущей работы в течение семестра и включает оценку результатов выполнения лабораторных работ, качество усвоения лекционного материала, посещение аудиторных занятий.

Для получения зачета необходимо правильно выполнить не менее 50% лабораторных работ.

I модуль (максимум 40 баллов)

II модуль (максимум 40 баллов)

Зачет (максимум 20 баллов)

Итого (5 семестр): 100 баллов.

Семестр 6 (всего 100 баллов)

I модуль (максимум 30 баллов)

Математическая модель, построение математической модели, основные этапы математического моделирования. Вычислительный эксперимент.

Постановка математической задачи. Решение математической задачи. Общая погрешность решения задачи.

Методы численного решения задач. Вычислительные методы в физике и химии.

Внутримолекулярные взаимодействия. Валентные и невалентные взаимодействия (подсчеты числа взаимодействий в разных молекулах).

Эквивалентность взаимодействий.

II модуль (максимум 30 баллов)

Феноменологические методы. Исходные физические предпосылки. Основной постулат. Общая математическая модель. Связь с квантовой механикой. Межмолекулярная составляющая.

Построение схем расчета и прогнозирования для отдельных классов химических соединений (замещенных метана и его аналогов, этана, пропана, этилена, бензола, циклопропана и др.). Вывод рабочих формул. Установление взаимосвязи между различными схемами. Предсказательные возможности теории.

Определение параметров схем расчёта. Система линейных алгебраических уравнений. Метод наименьших квадратов. Результаты расчёта. Погрешности: средняя абсолютная ошибка расчета, максимальное отклонение. Сопоставление с экспериментом.

Экзамен (максимум 40 баллов)

Итого (6 семестр): 100 баллов.

VII. Материально-техническое обеспечение дисциплины

В ходе изучения дисциплины используется приборная база для проведения физико-химического анализа, которым располагают лаборатории кафедры физической химии химико-технологического факультета.

- Компьютеры

- Учебная аудитория с мультимедийной установкой

<p>Аудитория кафедры физической химии. № 408, 170002, Тверская обл., г. Тверь, пер. Садовый, д. 35</p>	<p>Столы, стулья, доска учебная, стационарный мультимедийный проектор, стационарный экран УФ-спектрометр Specord-VIS M40, ИК-спектрометр Specord-M75, лабораторный фотоэлектрический абсорбиометр-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 мутномер НАСН 2100NIS, лабораторные столы, лабораторная химическая посуда, реактивы MS Office 365 pro plus – Акт приема-передачи № 369 от 21 июля 2017</p>
<p>Аудитория кафедры физической химии №412, 170002, Тверская обл., г. Тверь, пер. Садовый, д. 35</p>	<p>Весы (технические), весы аналитические лабораторные ВЛ-120, сушильный шкаф, вытяжные шкафы, муфельная печь, монометр универсальный ЭВ-74, баня-термостат WB-4MS, калориметр ФЭК-56, плитка электрическая, поляриметр AP-300, поляриметр СМ-3, фотокалориметр, дистиллятор, иономер И-130, монитор Samsung, спектрофотометр ПромЭкоЛаб ПЭ-5400В, лабораторные столы, стулья, лабораторная химическая посуда, реактивы, доска учебная</p>
<p>Компьютерный класс 4В (помещение для самостоятельной работы) 170002, Тверская обл., г. Тверь, пер. Садовый, д. 35</p>	<p>Столы, стулья, мультимедийный проектор, стационарный экран, Компьютеры MS Office 365 pro plus – Акт приема-передачи № 369 от 21 июля 2017; MS Windows 10 Enterprise – Акт приема-передачи № 369 от 21 июля 2017; Google Chrome – бесплатное ПО. Origin 8.1 Sr2 договор №13918/M4 от 24.09.2009 с ЗАО «СофтЛайн Трейд»; ISIS Draw 2.4 Standalone – бесплатное ПО HyperChem - акт предоставления прав № Tr008313 от 20.02.2016 г</p>

VIII. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины

№п.п.	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Реквизиты документа, утвердившего изменения
1.	Раздел V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	Дополнен список основной и дополнительной литературы	Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-технологического факультета
2.			