

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой

аналитической химии



Т.В. Елисеева

06.03.2025 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.07 Математические методы в химических исследованиях

- 1. Код и наименование направления подготовки:** 04.04.01 Химия
- 2. Профиль подготовки:** Химия
- 3. Квалификация выпускника:** Магистр
- 4. Форма обучения:** Очная
- 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:** 1002 аналитической химии
- 6. Составители программы:** Бутырская Елена Васильевна, д.х.н., проф.,
Паршина Анна Валерьевна, д.х.н.
- 7. Рекомендована:** Научно-методический Совет химического факультета, 13.02.2025,
протокол № 10-02
- 8. Учебный год:** 2025 / 2026

Семестр(ы): 2

9. Цели и задачи учебной дисциплины

Целью освоения учебной дисциплины является:

– формирование знаний и умений по метрологии и хемометрике, необходимых для обработки многомерных данных и многофакторного моделирования физико-химического эксперимента посредством применения проекционных математических методов, позволяющих выделять в больших массивах данных скрытые (латентные) переменные и анализировать связи, существующие в изучаемой системе, а также формирование знаний и умений применения программы Gaussian в современных методах анализа и к решению научно-исследовательских задач в химии, в том числе к определению направления развития работ и перспектив практического применения полученных результатов.

Задачи учебной дисциплины:

– ознакомиться с основными метрологическими понятиями, овладеть приемами оценки погрешностей прямых и косвенных измерений;

– ознакомиться с законами распределения случайных величин и их применением для обработки результатов физико-химического эксперимента, овладеть алгоритмами проверки статистических гипотез;

– ознакомиться с основами корреляционного, дисперсионного и регрессионного анализа и их применением в физико-химическом эксперименте, овладеть алгоритмами многомерного математического моделирования применительно к решению задач химических исследований;

– овладеть способами эффективного извлечения информации из экспериментальных данных для перехода на новый уровень понимания химических процессов и систем, учитывающий межкомпонентные (межфакторные) взаимодействия;

– приобрести знания об основных методах квантовой химии и уметь их применять при выборе метода решения конкретной задачи химического исследования;

– освоить возможности программы Gaussian для ее применения в современных методах анализа и интерпретации результатов научных исследований;

– самостоятельно выполнять компьютерное моделирование структуры и основных свойств молекулярных систем с помощью программы Gaussian и уметь применять их для выбора перспектив дальнейших исследований;

– выполнять обработку и анализ данных компьютерного моделирования;

– составлять отчет по результатам квантово-химического моделирования.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП

Часть, формируемая участниками образовательных отношений Блока 1. Дисциплины (модули).

Требования к входным знаниям, умениям и навыкам: базовые знания фундаментальных разделов физики, физической и аналитической химии, навыки практической работы в области физики и химии, владение математическим аппаратом и основами информатики в объеме, необходимом для освоения математической статистики, многомерных математических методов и программы Gaussian.

Дисциплины, для которых данная дисциплина является предшествующей: компьютерные технологии в научных исследованиях, методы разделения и концентрирования в научных исследованиях и химическом производстве, экологическая химия, современные методы исследования наноматериалов, производственная практика (научно-исследовательская работа), производственная практика (преддипломная).

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями) и индикаторами их достижения

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ПК – 2	Способен применять современные методы анализа, синтеза и моделирования для решения сложных	ПК - 2.1	Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных его стадий	Знать: основные способы планирования и метрологические аспекты выполнения физико-химического эксперимента, а также способы интерпретации эксперимента методами квантовой химии

	научно-исследовательских задач в химии с целью разработки новых веществ и материалов			Уметь: обеспечить единство измерений и оценить показатели их точности при выполнении физико-химических исследований, использовать возможности программы Gaussian для решения научно-исследовательских задач. Владеть: приемами хемометрики, позволяющими выявлять скрытые взаимосвязи между качественными и количественными признаками объекта исследования, в том числе установленными разными методами, в разное время, разными исследователями, а также приемами квантово-химического моделирования.
		ПК - 2.2	Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	Знать: основные математические функции, используемые в компьютерных программах математических и статистических методов применительно к обработке результатов физико-химического эксперимента и моделированию физико-химических систем, теоретические основы программы Gaussian. Уметь: составлять и применять алгоритмы в основных компьютерных программах математических и статистических методов для решения задач физико-химических исследований, в том числе выполнять моделирование структуры и основных свойств молекулярных систем с использованием программы Gaussian. Владеть: теоретическими и практическими навыками работы в основных компьютерных программах математических, статистических и других методов, основанных на формальной логике, для представления и анализа результатов химических исследований, а также в программе Gaussian для квантово-химического моделирования.

ПК – 3	Обладает навыками критической оценки результатов научно-исследовательских работ (НИР) и научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ (НИОКР) для определения перспектив их использования в реальных приложениях и продолжения разработок в различных областях химии	ПК - 3.1	Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными	Знать: основные принципы и подходы для выполнения НИР и НИОКР в области химии, в том числе по теме магистерской диссертации с применением многофакторного планирования эксперимента и квантово-химического моделирования. Уметь: формулировать статистически обоснованные и математически доказанные выводы по результатам НИР и НИОКР по теме магистерской диссертации, а также применять компьютерное моделирование для интерпретации результатов анализа и решения научно-исследовательских задач в области химии. Владеть: навыками представления результатов НИР и НИОКР для публикации в научных изданиях по теме магистерской диссертации.
		ПК - 3.2	Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов	Знать: способы получения и прогнозирования информации об объекте исследования посредством математической обработки и графической визуализации многомерных результатов физико-химического эксперимента с использованием компьютерных программ, а также методы моделирования структуры и свойств молекулярных систем и возможности программы Gaussian для прогнозирования свойств соединений. Уметь: выбрать оптимальный экспериментальный и расчетно-теоретический метод решения поставленной задачи химического исследования, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов, определять путь развития работ. Владеть: основными приемами корреляционного, дисперсионного и регрессионного методов применительно к анализу и моделированию многофакторных систем и квантово-химического моделирования применительно к современным методам анализа.

Форма промежуточной аттестации (зачет/экзамен) – экзамен.

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы		Всего	Трудоемкость			
			По семестрам			
				2 семестр		
Контактная работа		72		72		
в том числе:	Лекции	36		36		
	Практические	-		-		
	лабораторные	36		36		
Самостоятельная работа		144		144		
в том числе: курсовая работа (проект)		-		-		
Форма промежуточной аттестации (экзамен – час.)		экзамен – 36 час.		экзамен – 36 час.		
Итого:		252		252		

13.1. Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК *
1. Лекции			
1.1	Введение в метрологию и математическую статистику. Законы распределения случайных величин. Алгоритмы статистического анализа	Постулаты метрологии, основные метрологические понятия. Случайные и систематические погрешности, стандартное отклонение. Релятивизация. Рандомизация. Точность, правильность, воспроизводимость. Оценка погрешностей и стандартного отклонения прямых и косвенных измерений. Правила округления результатов прямых и косвенных измерений. Результат эксперимента как случайная величина. Законы распределения случайных величин. Нормальный закон распределения непрерывной случайной величины. Преобразование Лапласа. Оценка доверительной вероятности с помощью функции Лапласа. Выборочная совокупность. Распределение Стюдента. Алгоритмы анализа выборок различного объема. Проверка статистических гипотез. Ошибки 1-го и 2-го рода. Проверка гипотезы о типе распределения случайной величины (правило 3σ, асимметрия и эксцесс, критерий Пирсона). Проверка выборки на наличие грубых промахов (Q-критерий, τ-критерий). Проверка гипотезы о равенстве дисперсий (критерии Фишера, Кохрана, Бартлетта). Проверка гипотезы о равенстве математических ожиданий (критерий Стюдента).	ЭУМК, Курс: Основы метрологии и хеометрики (vsu.ru)
1.2	Основы хеометрики. Алгоритмы многомерного математического анализа результатов многофакторного эксперимента.	Хеометрика, многофакторный эксперимент, планирование эксперимента. Параметры и факторы в физико-химическом эксперименте. Основы дисперсионного анализа, однофакторный и двухфакторный дисперсионный анализ. Основы корреляционного анализа, оценка попарных коэффициентов корреляции, оценка мультиколлинеарности. Основы регрессионного анализа. Метод наименьших квадратов. Одномерная регрессия:	ЭУМК, Курс: Основы метрологии и хеометрики (vsu.ru)

		метод градуировочного графика, статистический подход для оценки пределов обнаружения. Многомерная регрессия: ортогональные и неортогональные схемы эксперимента. Непараметрические методы обработки данных.	
1.3	Возможности программы Gaussian для решения научно-исследовательских задач в химии. Методы квантовой химии в программе Gaussian для интерпретации результатов анализа и научных исследований в химии. Интерфейс программ Gaussian и GaussView и методы квантово-химического моделирования.	Молекулярное уравнение Шредингера, адиабатическое приближение. Наборы базисных функций программы Gaussian: минимальный базисный набор, валентно-расщепленные наборы, наборы с поляризационными функциями, диффузные функции. Главное окно программы Gaussian. Checkpoint файл, секция выбора маршрута, секция молекулярной спецификации. Способы задания начальной структуры молекулы. Z- матрица. Расчет УФ спектров молекул. Понятие заряд на атоме по Малликену. Индексы реакционной способности. Функции Фукуи. Поверхность потенциальной энергии многоатомной системы. Классификация стационарных точек на ППЭ. Нормальные колебания. Расчет ИК спектров молекул. Путь химической реакции, расчет переходных состояний реакций. Расчет спектров ЯМР в программе Gaussian.	ЭУМК, Компьютерное моделирование химических структур копия 1 https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=6382
2. Лабораторные занятия			
2.1	Введение в метрологию и математическую статистику. Законы распределения случайных величин. Алгоритмы статистического анализа	Представление результатов прямых и косвенных измерений. Анализ малых и представительных выборок, в том числе на примере собственных результатов НИР, выполняемой в рамках подготовки магистерской диссертации. Статистическое сравнение выборочных параметров. Проверка статистической гипотезы о типе распределения случайной величины. Реализация алгоритмов статистического анализа в программе Microsoft Excel.	ЭУМК, Курс: Основы метрологии и хеометрики (vsu.ru)
2.2	Основы хеометрики. Алгоритмы многомерного математического анализа результатов многофакторного эксперимента.	Оценка значимости влияния факторов на измеряемую величину в физико-химическом эксперименте с помощью алгоритмов однофакторного и двухфакторного дисперсионного анализа, в том числе на примере собственных результатов НИР, выполняемой в рамках подготовки магистерской диссертации. Оценка коэффициента парной корреляции, построение одномерных линейных градуировочных зависимостей и статистическая оценка пределов обнаружения аналитического метода, в том числе на примере собственных результатов НИР, выполняемой в рамках подготовки магистерской диссертации. Установление многомерных градуировочных зависимостей по неортогональным схемам эксперимента. Реализация хеометрических алгоритмов в	ЭУМК, Курс: Основы метрологии и хеометрики (vsu.ru)

		программах Microsoft Excel и Python.	
2.3	Возможности программы Gaussian для решения научно-исследовательских задач в химии. Методы квантовой химии в программе Gaussian для расчета структуры и свойств БАВ. Интерфейс программ Gaussian и GausView. Основы практической работы с программами Gaussian и GausView.	Рабочий стол программы Gaussian. Назначение кнопок и окон программы. Построение структур химических соединений с помощью программы Gausview. Изучение базы данных Pubchem и главного окна программы GAUSSIAN. Расчет энергии диссоциации двухатомной молекулы и энергии связи многоатомной молекулы. Расчет энергии димеризации молекулы воды с учетом поправки BSSE. Расчет УФ спектров аминокислот. Расчет индексов реакционной способности Фукуи молекул. Сканирование поверхности потенциальной энергии. Расчет ИК спектров и термодинамических функций молекулярных систем. Расчет переходных состояний химических реакций. Расчет спектров ЯМР.	ЭУМК, Компьютерное моделирование химических структур копия 1 https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=6382

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (количество часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Введение в метрологию и математическую статистику. Законы распределения случайных величин. Алгоритмы статистического анализа	6	0	6	24	36
2	Основы хемометрики. Алгоритмы многомерного математического анализа результатов многофакторного эксперимента.	12	0	12	48	72
3	Возможности программы Gaussian для решения научно-исследовательских задач в химии. Методы квантовой химии в программе Gaussian для расчета структуры и свойств БАВ. Интерфейс программ Gaussian и GausView. Основы практической работы с программами Gaussian и GausView.	18	0	18	72	108

Итого:	36	0	36	144	216
--------	----	---	----	-----	-----

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Дисциплина реализуется с привлечением дистанционных образовательных технологий. Лекции реализуются с использованием инструментов электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru>), сервиса видеоконференций (BigBlueButton). Лабораторные занятия реализуются в очном формате.

Основными учебными материалами при освоении дисциплины являются презентации лекций, аудиозаписи лекций, записи демонстраций реализации алгоритмов статистического, хемометрического анализа и моделирования, размещенные в ЭУМК, а также собственные конспекты лекций и результаты лабораторных занятий.

Студенты выполняют самостоятельную работу, пользуясь основной, дополнительной литературой, учебными материалами, размещенными в ЭУМК, и другими ресурсами для электронного обучения п. 15, 16.

Обучение и аттестация лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется с учетом их индивидуальных психофизических особенностей. Все необходимые для освоения дисциплины материалы дублируются в визуальной и аудиальной форме в ЭУМК. На лабораторные занятия, реализуемых очно, допускается присутствие ассистентов и использование вспомогательных устройств для записи и хранения информации, в том числе преобразования визуальной информации в аудиальную и наоборот. При необходимости лабораторные занятия могут быть реализованы в дистанционном формате. Промежуточная аттестация студентов с нарушениями слуха проводится в письменной форме с общими критериями оценивания. Промежуточная аттестация студентов с нарушениями зрения проводится в устной форме с общими критериями оценивания. Промежуточная аттестация студентов с нарушениями опорно-двигательного аппарата может быть реализована дистанционно. При необходимости время подготовки при аттестации может быть увеличено.

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Смагунова А.Н. Методы математической статистики в аналитической химии : учеб. пособие для вузов / А. Н. Смагунова, О. М. Карпукова. – Ростов-на-Дону.: Феникс, 2012. – 346 с. : ил. – Библиогр.: с. 324-328. – ISBN 978-5-222-19507-9. – Текст : непосредственный.
2	Введение в хемометрику / С. Кучерявский, В. Панчук, Ю. Монахова, Д. Кирсанов Текст : электронный. – 2023. – URL: https://github.com/chemometrics-ru/book (дата обращения: 12.03.2025).
3	Степанов, Николай Федорович. Квантовая механика и квантовая химия : учебник и практикум для академического бакалавриата / Н.Ф.Степанов. — М. : Юрайт, 2018. - Ч. 1. — 2-е изд., испр. и доп. — 232.
4	Степанов, Николай Федорович. Квантовая механика и квантовая химия : учебник и практикум для академического бакалавриата / Н.Ф.Степанов. — М. : Юрайт, 2018. - Ч. 2. — 2-е изд., испр. и доп. — 282.
5	Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие для вузов / В.Г. Цирельсон - Москва : Лаборатория знаний, 2017. - 522 с. (Учебник для высшей школы) - ISBN 978-5-00101-502-4. - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001015024.html
6	Каплан И.Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы / И.Г. Каплан – Москва : Лаборатория знаний, 2017. – 397 с. – ISBN 978-5-00101-503-1. – Текст : электронный // ЭБС «Консультант студента» : [сайт]. – URL : https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001015031.html .

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
7	Аналитическая химия. Учеб. для студ. высш. учеб. завед. В 3 т. Т. 3. Химический анализ / И.Г. Зенкевич, С.С. Ермаков, Л.А. Карцова [и др.] ; под ред. Л.Н. Москвина. – Москва : Академия, 2010. – 368, [1] с. : ил., табл. – Библиогр.: с. 356-359. – ISBN 978-5-7695-3957-2. – Текст : непосредственный.
8	Основы аналитической химии. Учеб. для вузов. В 2 т. Т 2. Методы химического анализа / Н.В. Алов, Ю.А. Барбалат, А.Г. Борзенко [и др.] ; под ред. Ю. А. Золотова; – Москва : Академия, 2014. – [6-е изд.,

	перераб. и доп.]. – 409, [1] с. : ил. – Библиогр. в конце гл. – ISBN 978-5-4468-0518-1. – Текст : непосредственный.
9	Foresman J.B. Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods / J.B. Foresman., A.E. Frisch. — Pittsburgh, PA : Gaussian, 2003. — 111 p..
10	Бутырская, Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView / Е.В. Бутырская. — М. : СОЛОН-ПРЕСС, 2011. — 218 с.
11	Соловьев М.Е. Компьютерная химия / М.Е. Соловьев, М.М. Соловьев. — М. : СОЛОН-Пресс, 2005. — 535 с.
12	Кларк Т. Компьютерная химия: пер. с англ. / Т. Кларк. - М. : Мир, 1990. – 383 с.
13	Минкин В.И. Теория строения молекул / В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Мигяев. – Ростов н/Д. : Феникс, 1997 – 550 с.
14	Попл Д.А. Квантово химические модели / Д.А. Попл // Успехи физ. наук. – 2002. – Т. 172, №3. – С. 349-356.
15	Кон В. Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности / В. Кон // Успехи физ. наук. – 2002. – Т. 172, № 3. – С. 336-349.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет)*:

№ п/п	Ресурс
16	ЭУМК, Курс: Основы метрологии и хеометрики (vsu.ru)
	ЭУМК, Компьютерное моделирование химических структур копия 1 https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=6382
17	ЗНБ ВГУ, www.lib.vsu.ru/
18	Электронно-библиотечная система BOOK.ru, https://www.book.ru/
19	Электронно-библиотечная система "Университетская библиотека online", http://biblioclub.ru/
20	http://www.gaussian.com
21	Практикум по компьютерной химии [Электронный ресурс] : методические указания для магистрантов 2-го года обучения химического факультета : [для направления 04.03.01 - Химия] / Воронеж. гос. ун-т ; сост.: Е.В. Бутырская, В.А. Шапошник. — Электрон. текстовые дан. — Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2018. — Загл. с титула экрана. — Свободный доступ из интрасети ВГУ. — Текстовый файл. — <URL: http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m18-220.pdf >.
22	Компьютерное моделирование химических структур [Электронный ресурс] : учебное пособие для магистров 2-го года обучения химического факультета : [для направления 04.04.01 - Химия] / Воронеж. гос. ун-т ; сост.: Е.В. Бутырская, В.А. Шапошник, В.И. Васильева. — Электрон. текстовые дан. — Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2023. — Загл. с титула экрана. — Свободный доступ из интрасети ВГУ. — Текстовый файл. — < ">https://ruslan-neo.lib.vsu.ru/pwb-lib/?cq=cql.allIndexes%20all%20%22Е.%20В.%20Бутырская%2С%20В.А.%20Шапошник%2С%20В.И.%20Васильева%20%20Компьютерное%20моделирование%20химических%20структур%202023%22%20and%20(dc.type%3DElectronic)> >.

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ п/п	Источник
1	Паршина А.В. Математическая обработка результатов эксперимента : методические указания к лабораторным работам / А. В. Паршина, О. В. Бобрешова. – Воронеж : Издательско-полиграфический центр «Научная книга», 2021. – 28 с. – ISBN 978-5-4446-1548-5. – Текст : непосредственный.
2	Специализированный компьютерный класс для выполнения студентами работ по дисциплине «Компьютерное моделирование химических структур», включающий 12 рабочих компьютеров на основе Pentium 4;
3	Программный продукт Gaussian03 Rev. C.02; программный продукт Gaussview 3.09
4	Компьютерная химия : учебно-методическое пособие для вузов : [для студ. 5 к. очной формы обуч. хим. фак. специальности 020101 - Химия] / Воронеж. гос. ун-т ; сост.: Е.В. Бутырская, Л.С. Нечаева. — Воронеж : Издательско-полиграфический центр Воронежского государственного университета, 2011. — 27 с. : ил. — Библиогр.: с. 27.
5	Компьютерная химия: учебное пособие для магистров 2 года обучения химического факультета по направлению 04.-4.01 - Химия; сост.: Е.В. Бутырская, В.А. Шапошник, В.И. Васильева. - Воронеж: Научная книга, 2021. - 81с.: ил. — Библиогр.: с. 81.
6	Компьютерное моделирование химических структур: учебное пособие для магистров 2 года обучения химического факультета по направлению 04.-4.01 - Химия; сост.: Е.В. Бутырская, В.А. Шапошник, В.И. Васильева. - Воронеж: Издательский дом ВГУ, 2023. - 81с.: ил. — Библиогр.: с. 81.

17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ), электронное обучение (ЭО), смешанное обучение)

При реализации учебной дисциплины используются элементы электронного обучения (ЭО) и дистанционные образовательные технологии (ДОТ) в части освоения лекционного материала и самостоятельной работы обучающихся по дисциплине, позволяющие обеспечивать опосредованное взаимодействие (на расстоянии) преподавателей и обучающихся с использованием инструментов электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru>). Смешанное обучение может распространяться на лабораторные занятия для обеспечения равнодоступной и качественной образовательной среды, в том числе для лиц с ограниченными возможностями здоровья. Для освоения дисциплины рекомендуется список литературы и ресурсы для ЭО (п. 15).

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Специализированный компьютерный класс для выполнения студентами лабораторных работ по дисциплине «Математические методы в химических исследованиях», включающий 12 рабочих компьютеров на основе Pentium 4; программный продукт Gaussian09 Bin License EM64T-SSE4/LX; программный продукт Gaussview 3.09; суперкомпьютер ВГУ.

19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций

По решению кафедры оценки за экзамен/зачет могут быть выставлены по результатам текущей аттестации обучающегося в семестре, но не ранее, чем на заключительном занятии. При несогласии студента с оценкой последний вправе сдавать экзамен/зачет на общих основаниях.

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1.	Введение в метрологию и математическую статистику. Законы распределения случайных величин. Алгоритмы статистического анализа	ПК – 2 ПК – 3	ПКВ - 2.1 ПКВ - 2.2 ПКВ - 3.1 ПКВ - 3.2	Устный опрос, сдача лабораторных работ, контрольная работа №1.
2.	Основы хемометрики. Алгоритмы многомерного математического анализа результатов многофакторного эксперимента.	ПК – 2 ПК – 3	ПКВ - 2.1 ПКВ - 2.2 ПКВ - 3.1 ПКВ - 3.2	Устный опрос, сдача лабораторных работ, контрольная работа №2.
3.	Возможности программы Gaussian для решения научно-исследовательских задач в химии. Методы квантовой химии в программе Gaussian для расчета структуры и свойств БАВ. Интерфейс программ Gaussian и GausView. Основы практической работы с программами	ПК – 2 ПК – 3	ПКВ - 2.1 ПКВ - 2.2 ПКВ - 3.1 ПКВ - 3.2	Устный опрос, сдача лабораторных работ, контрольная работа № 3-4.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
	Gaussian и GausView.			
Промежуточная аттестация форма контроля – экзамен				Билеты к экзамену

20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

20.1 Текущий контроль успеваемости

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Контрольная работа 1

Перечень вопросов №1:

- 1) Классификация ошибок: погрешности и отклонения, абсолютные и относительные, систематические (классификация, примеры) и случайные. Виды систематических ошибок, методы их устранения (продемонстрировать на примере конкретного физико-химического метода анализа). Количественная оценка ошибок. Точность, правильность, воспроизводимость, их количественная оценка. Правила округления.
- 2) Случайная величина. Непрерывная случайная величина. Генеральная совокупность. Нормальный закон распределения непрерывной случайной величины (формулировка, графический и аналитический вид). Преобразование Лапласа, графический и аналитический вид закона Гаусса-Лапласа. Оценка доверительной вероятности с помощью функции Лапласа (формула). Докажите, что параметры стандартного нормированного распределения непрерывной случайной величины Гаусса-Лапласа равны соответственно: $\mu(u)=0$, $\sigma(u)=1$.
- 3) Случайная величина. Генеральная совокупность, математическое ожидание, дисперсия, среднеквадратическое отклонение. Выборочная совокупность, среднее значение, стандартное отклонение. Докажите, что дисперсия среднего значения выборки, объемом n , в n раз меньше дисперсии единичного значения. Распределение Стьюдента. Алгоритм анализа малой выборки.

Перечень вопросов №2:

- 1) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 70; 71; 73; 66; 69; 66; 65; 100.
- 2) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 84; 94; 86; 90; 84; 82; 85; 110.
- 3) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 123; 125; 125; 120; 128; 125; 123; 100.
- 4) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 138; 140; 143; 144; 143; 144; 144; 100.
- 5) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 182; 185; 183; 180; 186; 177; 180; 100.
- 6) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 188; 193; 199; 193; 194; 195; 189; 100.
- 7) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 224; 228; 213; 233; 221; 223; 224; 100.
- 8) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 65; 73; 62; 63; 72; 66; 66; 100.
- 9) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 76; 90; 77; 78; 82; 80; 82; 110.
- 10) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (Е, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 123; 128; 121; 120; 123; 122; 119; 100.

- 11) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (E, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 194; 180; 188; 187; 197; 204; 194; 100.
- 12) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (E, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 166; 170; 183; 181; 183; 171; 181; 100.
- 13) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (E, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 140; 137; 142; 144; 147; 141; 131; 100.
- 14) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (E, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 118; 118; 111; 118; 122; 127; 117; 90.
- 15) Выполните статистический анализ результатов эксперимента (E, мВ) при доверительной вероятности $p=0.95$: 208; 202; 213; 225; 213; 218; 217; 100.

Описание технологии проведения: письменная работа.

Письменная работа выполняется по билетам, на выполнение работы предоставляется 2 академических часа, допускается использование непрограммируемого калькулятора и справочных материалов, предоставляемых преподавателем, собеседование проводится строго по вопросам билета.

Критерии оценивания: отлично – 95-100%, хорошо – 75-80%, удовлетворительно – 55-60%, неудовлетворительно – менее 55%.

Контрольная работа 2

Перечень вопросов №1:

- 1) Статистическая гипотеза. Нулевая и обратная статистические гипотезы. Общий алгоритм проверки статистической гипотезы. Принципиальный алгоритм проверки статистической гипотезы о принадлежности двух выборок к одной генеральной совокупности.
- 2) Статистическая гипотеза. Нулевая и обратная статистические гипотезы. Общий алгоритм проверки статистической гипотезы. Сформулируйте и докажите правило 3σ . Алгоритмы проверки выборок разного объема ($n \geq 50$, $n \leq 30$, $n \leq 10$) на наличие грубых промахов.
- 3) Статистическая гипотеза. Нулевая и обратная статистические гипотезы. Общий алгоритм проверки статистической гипотезы. Алгоритм проверки типа распределения случайной величины по критерию Пирсона.

Перечень вопросов №2:

- 1) Хемометрика. Статистическая модель. Факторы и параметры эксперимента. Кратко охарактеризуйте типы подходов к планированию многофакторного эксперимента.
- 2) Корреляционный анализ. Условия применения. Факторы и параметры эксперимента. Применение в аналитической химии.
- 3) Дисперсионный анализ. Условия применения. Факторы и параметры эксперимента. Применение в аналитической химии.
- 4) Регрессионный анализ. Этапы. Условия применения классических алгоритмов регрессионного анализа. Применение в аналитической химии.

Описание технологии проведения: письменная работа.

Письменная работа выполняется по билетам, на выполнение работы предоставляется 2 академических часа, допускается использование непрограммируемого калькулятора и справочных материалов, предоставляемых преподавателем, собеседование проводится строго по вопросам билета.

Критерии оценивания: отлично – 95-100%, хорошо – 75-80%, удовлетворительно – 55-60%, неудовлетворительно – менее 55%.

Контрольная работа 3

Перечень вопросов №1:

- 1) Возможности программы Gaussian для расчета свойств молекул.
- 2) Назначение кнопок и окон программы GaussView.
- 3) Что обозначают клавиши

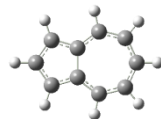


4) Что обозначают клавиши

- 5) Нахождение координат атомов молекулярных структур с помощью базы данных pubchem.
- 6) Молекулярное уравнение Шредингера. Метод самосогласованного поля.
- 7) Слэтеровский тип и гауссовский тип базисных функций.
- 8) Наборы базисных функций.
- 9) Определение энергии диссоциации двухатомной молекулы и энергии связи многоатомной молекулы.
- 10) Заряды на атомах по Малликену.
- 11) BSSE ошибка.
- 12) Главное окно программы GAUSSIAN

Перечень вопросов №2:

- 1) Построить с помощью программы GaussView структуры молекул, указанных преподавателем. Для построенных структур; - подписать символы элементов шрифтом 24; - указать длины связей между атомами 1 и 2, 3 и 4, 5 и 6, валентный угол; - сохранить структуру как рисунок и вставить ее в Microsoft Word.
- 2) Рассчитать энергию молекулы, указанной преподавателем методами HF/6-311G, MP2/3-21G, B3LYP/6-31G(d), занести в таблицу значения энергии, дипольного момента, зарядов на атомах по Малликену.
- 3) С помощью базы данных Pubchem построить структуру молекулы, указанной преподавателем, рассчитать ее энергию методом B3LYP/6-31G(D,P) без проведения оптимизации.
- 4) Выполнить частичную оптимизацию структур молекул или ее фрагментов, указанных преподавателем, исключив часть атомов из оптимизации (-1).



- 5) Определить место атаки молекулы азулена электрофильной частицей нитроний катионом NO_2^+ . Выполнить оптимизацию и рассчитать энергию молекулы нитроазулена (метод pm6).



- 6) Рассчитать заряды на атомах молекулы пиридина и определить место атаки данной молекулы нуклеофильным агентом - анионом NH_2^- в реакции аминирования пиридина амидом натрия. Выполнить оптимизацию и рассчитать энергию молекулы аминопиридина (метод pm6).

Описание технологии проведения: письменная работа.

Письменная работа выполняется по билетам, на выполнение работы предоставляется 2 академических часа, допускается использование непрограммируемого калькулятора и справочных материалов, предоставляемых преподавателем, собеседование проводится строго по вопросам билета.

Критерии оценивания: отлично – 95-100%, хорошо – 75-80%, удовлетворительно – 55-60%, неудовлетворительно – менее 55%.

Контрольная работа 4

Перечень вопросов №1:

- 1) Задание исходной конфигурации молекулы.
- 2) Индексы реакционной способности Фукуи.

3) Глобальные и локальные индексы реакционной способности, электроотрицательность (χ), жесткость (η), мягкость (S), индекс электрофильности (ω)

3) Орбитальный и зарядовый контроль химической реакции.

4) Решение колебательной задачи в программе Gaussian. Определение формы колебания молекулы в программе GaussView.

5) Классификация стационарных точек на ППЭ.

6) Поверхность потенциальной энергии. Переходное состояние.

7) Правило Хэммонда. Приближение изолированной молекулы. Приближение локализации.

8) Ключевые слова поиска переходного состояния TS, QST2, QST3.

9) Основные понятия явления ядерного магнитного резонанса и расчет спектров ЯМР в программе Gaussian.

10) Визуализация спектров ЯМР в программе GaussView.

Перечень вопросов №2:

1) Рассчитать энергию связи СН связи в молекуле глюкозы (метод pm6). Сравнить длины всех связей СН в оптимизированной структуре. Построить график зависимости энергии молекулы от шага оптимизации.

2) Понятие "Энергия химической связи". Формулы для расчета энергии химической связи в двухатомных и многоатомных молекулах.

3) Построить графическое изображение молекулярной орбитали с помощью программы GaussView (пункт Surface в меню Results).

4) Рассчитать индексы Фукуи молекулы, указанной преподавателем.

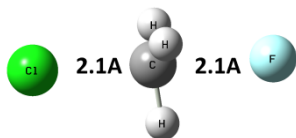
5) Сравните нуклеофильность молекул пиридазина и пиримидина, рассчитав соответствующий индекс реакционной способности. Какой индекс требуется для ответа на вопрос?

6) Найдите место атаки нуклеофилом пиррола, рассчитав соответствующий индекс Фукуи.

6) Рассчитать УФ спектр молекулы глицина и выполнить его визуализацию.

7) Выполнить расчет сродства к электрону, потенциала ионизации для молекулы, указанной преподавателем.

8) Выполнить расчет жесткости и индексов реакционной способности Фукуи молекулы указанной преподавателем.



9) Молекула является переходным состоянием реакции $\text{FCH}_3 + \text{Cl} = \text{ClCH}_3 + \text{F}$. Построить начальную структуру переходного состояния с помощью программы GaussView. С помощью процедуры TS показать, что структура на рисунке действительно является переходным состоянием (заряд -1, мультиплетность 1, маршрут Opt=(CalcFC,TS,noeigentest,maxcycle=200) freq hf/6-31+g(d). Уточнить расстояния C - Cl и C - F. Что является признаком переходного состояния в выходном файле программы Gaussian?

10) Найти химический сдвиг ядра атома Н молекулы аммиака относительно эталона тетраметилсилана в методе HF/6-31G(d).

Описание технологии проведения: письменная работа.

Письменная работа выполняется по билетам, на выполнение работы предоставляется 2 академических часа, допускается использование непрограммируемого калькулятора и справочных материалов, предоставляемых преподавателем, собеседование проводится строго по вопросам билета.

Критерии оценивания: отлично – 95-100%, хорошо – 75-80%, удовлетворительно – 55-60%, неудовлетворительно – менее 55%.

20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Собеседование по билетам к экзамену

Перечень вопросов №1:

- 1) Метрология. Погрешность. Систематические (классификация, примеры, способы устранения) и случайные погрешности.
- 2) Метрология. Прямые и косвенные измерения. Погрешность. Оценка погрешностей прямых и косвенных измерений.
- 3) Метрология. Прямые и косвенные измерения. Стандартное отклонение, относительное стандартное отклонение. Оценка стандартного отклонения прямых и косвенных измерений.
- 4) Метрология. Прямые и косвенные измерения. Правила округления результатов прямых и косвенных измерений.
- 5) Метрология. Точность, правильность, воспроизводимость, их количественная оценка.
- 6) Случайная величина. Непрерывная случайная величина. Нормальный закон распределения непрерывной случайной величины (формулировка, графический и аналитический вид). Параметры закона Гаусса. Свойства функции плотности вероятности.
- 7) Случайная величина. Непрерывная случайная величина. Преобразование Лапласа, графический и аналитический вид закона Гаусса-Лапласа. Оценка доверительной вероятности с помощью функции Лапласа. Докажите, что параметры распределения Гаусса-Лапласа равны соответственно: $\mu(u)=0$, $\sigma(u)=1$.
- 8) Случайная величина. Выборочная совокупность, среднее значение, стандартное отклонение. Распределение Стьюдента. Докажите, что дисперсия среднего значения выборки, объемом n , в n раз меньше дисперсии единичного значения. Доверительный интервал, которому принадлежит ошибка единичного значения. Доверительный интервал, которому принадлежит ошибка среднего значения.
- 9) Статистическая гипотеза. Нулевая и обратная статистические гипотезы. Общий алгоритм проверки статистической гипотезы. Принципиальный алгоритм проверки статистической гипотезы о принадлежности двух выборок к одной генеральной совокупности.
- 10) Статистическая гипотеза. Нулевая и обратная статистические гипотезы. Общий алгоритм проверки статистической гипотезы. Алгоритм проверки типа распределения случайной величины по критерию Пирсона.
- 11) Главное окно программы Gaussian. Окно ввода работы.
- 12) Задание исходной конфигурации молекулы, декартовы координаты, Z- матрица.
- 13) Молекулярное уравнение Шредингера. Адиабатическое приближение, электронное и ядерное уравнения.
- 14) Метод самосогласованного поля. Методы Хартри, Хартри-Фока, Хартри-Фока-Рутана. Метод МО ЛКАО.
- 15) Анализ заселенностей по Малликену (Заряды на атомах).
- 16) Функции Фукуи.
- 17) Локальные и глобальные индексы реакционной способности.

Перечень вопросов №2:

- 1) Хемометрика. Корреляционный анализ. Условия применения. Факторы и параметры эксперимента. Применение в аналитической и/или физической химии.
- 2) Хемометрика. Дисперсионный анализ. Условия применения. Факторы и параметры эксперимента. Применение в аналитической и/или физической химии.
- 3) Хемометрика. Регрессионный анализ. Условия применения классических алгоритмов регрессионного анализа. Этапы регрессионного анализа. Применение в аналитической и/или физической химии.
- 4) Метод наименьших квадратов. Алгоритм установления одномерной линейной градуировочной зависимости. Статистическая оценка предела обнаружения.
- 5) Метод наименьших квадратов. Алгоритм многомерного регрессионного анализа, включая предварительный этап оценки корреляции между факторами.
- 6) Методы программы Gaussian. Общая характеристика. Ограниченный и неограниченный метод Хартри-Фока. Энергия электронной корреляции и ее учет.
- 7) Наборы базисных функций.
- 8) Ошибка суперпозиции базисных наборов BSSE.
- 9) Колебательная задача. Нормальные колебания. Ключевое слово Freq.
- 10) Поверхность потенциальной энергии (ППЭ). Классификация стационарных точек на ППЭ.
- 11) Путь химической реакции. Переходное состояние.
- 12) Ключевые слова поиска переходного состояния TS, QST2, QST3.
- 13) Расчет пути химической реакции в программе Gaussian.

14) Основные понятия явления ядерного магнитного резонанса, расчет и визуализация спектров ЯМР в программе Gaussian.

Перечень вопросов №3:

- 1) Выполните статистический анализ малой выборки при доверительной вероятности $p=0.95$: 70; 71; 73; 66; 69; 66; 65; 100.
- 2) Выполните статистический анализ малой выборки при доверительной вероятности $p=0.95$: 84; 94; 86; 90; 84; 82; 85; 110.
- 3) Выполните статистический анализ малой выборки при доверительной вероятности $p=0.95$: 123; 125; 125; 120; 128; 125; 123; 100.
- 4) Выполните статистический анализ малой выборки при доверительной вероятности $p=0.95$: 138; 140; 143; 144; 143; 144; 144; 100.
- 5) Выполните статистический анализ малой выборки при доверительной вероятности $p=0.95$: 182; 185; 183; 180; 186; 177; 180; 100.
- 6) Выполните статистический анализ малой выборки при доверительной вероятности $p=0.95$: 188; 193; 199; 193; 194; 195; 189; 100.
- 7) Выполните статистический анализ малой выборки при доверительной вероятности $p=0.95$: 224; 228; 213; 233; 221; 223; 224; 100.
- 8) Выполните статистический анализ малой выборки при доверительной вероятности $p=0.95$: 65; 73; 62; 63; 72; 66; 66; 100.
- 9) Выполните статистический анализ малой выборки при доверительной вероятности $p=0.95$: 76; 90; 77; 78; 82; 80; 82; 110.
- 10) Выполните статистический анализ малой выборки при доверительной вероятности $p=0.95$: 123; 128; 121; 120; 123; 122; 119; 100.
- 11) Нарисовать в активном окне молекулу метана, рассчитать ее колебательный спектр, метод MP2, базис 6-31G(d,p)). Найти и записать частоту валентного асимметричного C-H колебания.
- 12) Нарисовать в активном окне молекулу метанола CH₃OH. Рассчитать ее колебательный спектр, метод b3lyp, базис 6-31G(d,p)). Найти и записать в тетрадь частоту валентного O-H колебания.
- 13) Нарисовать в активном окне молекулу бензола, рассчитать ее колебательный спектр, метод B3LYP, базис 6-31G(d,p)). Найти и записать частоту валентного симметричного C-H колебания.
- 14) Построить графическое изображение молекулярной орбитали 2s (МО №2) атома водорода с помощью программы GaussView (пункт Surface в меню Results), зарисовать изображение (метод B3LYP, базис 6-31G**), указать оси координат.
- 15) Построить графическое изображение молекулярной орбитали 2p_y (МО №4) атома водорода с помощью программы GaussView (пункт Surface в меню Results), зарисовать изображение (метод B3LYP, базис 6-31G**), указать оси координат.
- 16) Выполнить сканирование потенциальной энергии молекулы N₂ с шагом 0.1 Å для изменения межъядерного расстояния от значения $R=R_e - 0.3$ до $R=R_e + 2$, где R_e – равновесное межъядерное расстояние (метод B3LYP, базис 6-31G**). Зарисовать вид потенциальной кривой.
- 17) Выполнить сканирование потенциальной энергии молекулы NaH с шагом 0.1 Å для изменения межъядерного расстояния от значения $R=R_e - 0.3$ до $R=R_e + 2$, где R_e – равновесное межъядерное расстояние (метод B3LYP, базис 6-31G**). Зарисовать вид потенциальной кривой.
- 18) Рассчитать и визуализировать УФ спектр молекулы аланина, метод b3lyp, базис 6-31G(d,p).
- 19) Рассчитать и визуализировать УФ спектр молекулы уриновой кислоты, метод b3lyp, базис 6-31G(d,p).
- 20) Рассчитать индексы фукуи молекулы, указанной преподавателем.
- 21) Сравните электрофильность молекул SO₂ и бензола, рассчитав соответствующий индекс реакционной способности. Какой индекс для требуется для ответа на вопрос?

Описание технологии проведения: собеседование по билетам.

На подготовку к устному ответу и составление плана-конспекта ответа обучающемуся предоставляется 1 академический час, допускается использование непрограммируемого калькулятора и справочных материалов, предоставляемых преподавателем, собеседование проводится строго по вопросам билета.

Требования к выполнению заданий, шкала и критерии оценивания:

№ п/п	Шкала	Требования и критерии
1	Отлично	Обучающийся в полной мере владеет теоретическими основами дисциплины, способен иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований, применять теоретические знания для решения практических задач.
2	Хорошо	Обучающийся владеет теоретическими основами дисциплины, способен иллюстрировать ответ примерами, применять теоретические знания для решения практических задач, допускает незначительные ошибки, неточности, которые исправлены после замечания преподавателя.
3	Удовлетворительно	Ответ на контрольно-измерительный материал неполный, без обоснований, объяснений. Демонстрирует частичные знания учебного материала, значительные затруднения в вопросах решения практических задач. Ошибки устраняются по дополнительным вопросам преподавателя.
4	Неудовлетворительно	Ответ на контрольно-измерительный фрагментарный. Обучающийся демонстрирует несистематические, отрывочные знания, допускает грубые, принципиальные ошибки, которые не устранены после дополнительных наводящих вопросов.

20.3 Контроль освоения ПК

Контроль освоения ПК-2.

ПК-2. Закрытые вопросы

1. Каковы основные показатели правильности результатов эксперимента (выберите два варианта)?

А стандартное отклонение

Б абсолютная погрешность

В относительная погрешность

2. Какая из указанных ошибок является характеристикой воспроизводимости результатов эксперимента (выберите один вариант)?

А стандартное отклонение

Б абсолютная погрешность

В относительная погрешность

3. Какие принципы выполнения эксперимента могут быть использованы способы устранения систематических ошибок (выберите два варианта)?

А дублирование эксперимента

Б релятивизация

В рандомизация

Г проверка выборки на наличие грубых промахов

4. Какой этап отсутствует в алгоритме статистического анализа малой выборки (выберите два варианта)?

А проверка выборки на наличие грубых промахов

Б сравнение дисперсий

В расчет доверительного интервала

Г сравнение средних

5. Среднее значение измеряемой величины составило 2.487, а ошибка его определения составила ± 0.1268 . Выберите вариант, в котором результат эксперимента представлен в соответствии с правилами округления.

A 2.48 ± 0.13

Б 2.5 ± 0.1

В 2.4 ± 0.13

6. Какая функция в программе EXCEL позволяет выполнить расчет доверительного интервала (выберите один вариант)?

А СТАНДОТКЛОН (или СТАНДОТКЛОН.В)

Б ДИСП (или ДИСП.В)

В ДОВЕРИТ (или ДОВЕРИТ.СТЬЮДЕНТ)

Г СРЗНАЧ

7. Какие функции в программе EXCEL могут быть использованы при реализации алгоритма проверки выборки на наличие грубых промахов по т-критерию (выберите четыре варианта)?

A МИН

Б СТАНДОТКЛОН (или СТАНДОТКЛОН.В)

В ДИСП (или ДИСП.В)

Г МАКС

Д ДОВЕРИТ (или ДОВЕРИТ.СТЬЮДЕНТ)

Е СРЗНАЧ

Ж СУММ

8. Какая функция в программе EXCEL позволяет выполнить расчет коэффициента корреляции (выберите один вариант)?

А СРЗНАЧ

Б СУММ

В КОРРЕЛ

Г ДИСП

Д МИН

9. Какие функции в программе EXCEL могут быть использованы для расчета коэффициентов регрессии матричным способом (выберите три варианта)?

А МОПРЕД(X)

Б ТРАНСП(X)

В МОБР(X)

Г МУМНОЖ(X;Y)

10. Область пространственных размеров нанотехнологий (в м)

А 10^{-6}

Б 10^{-9}

С 10^{-15}

Г Нет правильного ответа

11. Теория, лежащая в основе расчета УФ спектров молекулы с использованием программы Gaussian?

А DFT

Б TD DFT

С метод Хартри-Фока

Г Нет правильного ответа

12. Точка на поверхности потенциальной энергии является минимумом, если все элементы диагональной матрицы Гессе

А положительны

Б отрицательны

В один элемент имеет отрицательное значение, а остальные элементы положительны

Г нет правильного ответа

13. Как по рассчитанным частотам ИК спектра выявить, что найденная стационарная точка является переходным состоянием молекулы

А отсутствуют мнимые частоты

Б все частоты мнимые

В одна частота мнимая

Г нет правильного ответа

14. Как зависит от расстояния электрона до ядра r показатель экспоненты атомной орбитали гауссовского типа ?

А линейным образом

Б квадратичным образом

С не зависит

Г нет правильного ответа.

ПК-2. Комбинированные вопросы

1. Какая характеристика позволяет оценить отличие измеряемой величины от истинного значения?

Погрешность

2. Какая характеристика позволяет оценить отличие измеряемой величины от среднего значения?

Отклонение

3. Какой параметр выборки может быть рассчитан как отношение суммы всех вариантов к объему выборки?

Среднее значение

4. Какой параметр (выраженный в тех же единицах измерения, что и измеряемая величина) выборки характеризует средний разброс вариант относительно среднего значения?

Стандартное отклонение

5. Как называют значение выборки, сильно отличающееся от других значений выборки (значимость отличия устанавливается путем проверки статистической гипотезы)?

Грубый промах

6. Рассчитайте доверительный интервал, которому принадлежит ошибка среднего значения, если объем выборки $n=16$, коэффициент Стьюдента $t=2.13$ (при числе степеней свободы выборки 15 и доверительной вероятности 0.95), стандартное отклонение $s(x)=2$. Запишите полученное значение с учетом правил округления.

7. Какой из методов формализма самосогласованного поля используется при решении электронного уравнения Шредингера молекул ?

Метод Хартри-Фока-Рутана

8. Какой из методов формализма самосогласованного поля не учитывает принцип Паули?

Метод Хартри

9. Что называется контракцией ?

Линейная комбинация гауссовых функций.

10. Какое приближение лежит в основе метода самосогласованного поля?

Одноэлектронное приближение.

11. Какое приближение лежит в основе разделения электронного и ядерного движений в молекуле

Адиабатическое приближение.

12. Сформулируйте правило Хэммонда.

Электронное строение переходного состояния быстро протекающих реакций близко к строению исходных реагентов.

13. Какая характеристика указывает на то, что найденная структура является переходным состоянием?

В рассчитанном ИК спектре имеется одна мнимая частота.

14. Что такое Гессиан?

Матрица вторых частных производных функции потенциальной энергии по координатам.

ПК-2. Открытые вопросы

1. В чем состоит принцип дублирования эксперимента? Как называется совокупность данных, полученных при дублировании эксперимента?

Дублирование эксперимента – повтор измерений при одних и тех же условиях, заданных исследователем.

Совокупность данных, полученных при дублировании эксперимента, называют выборкой или выборочной совокупностью.

2. Дайте определение таким метрологическим понятиям как точность, правильность и воспроизводимость.

Точность – малость погрешности или близость измеренного значения к истинному.

Правильность – малость систематической погрешности или близость среднего значения к истинному.

Воспроизводимость – малость случайного разброса значений при дублировании эксперимента или близость измеренного значения к среднему.

3. Сформулируйте, в чем состоит основное отличие систематической и случайной погрешности.

Систематическая погрешность – постоянная по величине и знаку погрешность, которую необходимо учесть или устранить.

Случайная погрешность – переменная по величине и знаку погрешность, которую невозможно устранить при выполнении эксперимента.

4. Сформулируйте принципы релятивизации и рандомизации, используемые для устранения систематических погрешностей при выполнении эксперимента.

Релятивизация – выполнение измерений относительно объекта сравнения, т.е. рассмотрение разности результатов измерений для объекта исследования и объекта сравнения. Рандомизация – прием, переводящий систематические погрешности в разряд случайных посредством варьирования одновременно нескольких составляющих эксперимента без нарушения условий дублирования эксперимента.

5. В чем состоит нормальный закон распределения непрерывной случайной величины (закон Гаусса)? Дайте определение параметрам закона распределения случайной величины (математическое ожидание, дисперсия).

Если вероятность значений непрерывной случайной величины тем выше, чем ближе они к математическому ожиданию, тогда распределение случайной величины подчиняется нормальному закону (закону Гаусса).

Математическое ожидание – среднее значение из всех возможных значений случайной величины (генеральное среднее).

Дисперсия – математическое ожидание квадрата отклонения значений случайной величины от ее математического ожидания.

6. Что такое статистическая гипотеза и каков общий принципиальный алгоритм проверки статистической гипотезы?

Статистическая гипотеза – предположение о типе распределения или о свойствах параметров распределения случайной величины.

Алгоритм проверки статистической гипотезы включает следующие этапы: формулировка нулевой гипотезы; задание уровня значимости (или доверительной вероятности) на котором будет сделан вывод о справедливости или несправедливости гипотезы; выбор и расчет критерия проверки; сравнение рассчитанного значения критерия с его критическим значением. Критическое (максимально допустимое) значение критерия находят в соответствующей статистической таблице при заданном уровне значимости и числе степеней свободы. Если рассчитанное значение критерия не превышает критическое, то нулевая статистическая гипотеза верна, в противном случае верна обратная статистическая гипотеза.

7. В чем причины ошибки суперпозиции базисного набора BSSE?

Энергия системы E_{AB} вычисляется в более гибком базисном наборе по сравнению с расчетом энергий двух подсистем А и В. Именно, при расчете подсистем А (В) используется базис соответствующий А (В), а при расчете системы АВ используется базис, представляющий собой объединение базисов А и В.

8. Какие случаи возможны при анализе диагонализированной матрицы Гессе?

- Все диагональные элементы положительны, смещение из стационарной точки вдоль любого направления приводит к увеличению значения потенциальной энергии (стационарная точка – минимум).
- Все диагональные элементы отрицательны, стационарная точка – максимум.
- Наличие одного или нескольких различных знаков среди диагональных элементов Гессиана свидетельствует о том, что при смещении из стационарной точки существуют как направления возрастания потенциальной энергии, так и направления ее убывания. Стационарная точка, в которой Гессиан имеет только одно отрицательное собственное значение, называется седловой точкой 1-го порядка.

9. Почему для расчета молекул применяется метод Хартри-Фока –Рутана, а не метод Хартри-Фока?

Недостатками методов Хартри и Хартри-Фока кроме отсутствия решения в аналитическом виде являются большие математические трудности, которые в случае атомов частично устраняются наличием центральной симметрии системы. Для расчета молекул уравнения Хартри и Хартри-Фока практически не применяются вследствие серьезных математических трудностей. Для расчета молекул применяется метод Хартри-Фока –Рутана (ХФР), согласно которому молекулярная орбиталь ищется в виде линейной комбинации линейно-независимых функций. Это позволяет свести задачу к решению системы алгебраических уравнений на коэффициенты разложения молекулярных орбиталей по известным базисным функциям, которые встроены в программу, что существенно упрощает решение.

10. Что является причиной кулоновской корреляция в движении электронов?

Межэлектронное взаимодействие входит в уравнения Хартри-Фока–Рутана в интегральном виде через усредненное поле. Потенциал взаимодействия электронов 1 и 2 определяется только координатами электрона 1 (одноэлектронное приближение). Он не учитывает того, что электроны 1 и 2 стремятся находиться как можно дальше друг от друга. Поле, в котором движется электрон 1 не зависит от координат электрона 2, поэтому с точки зрения уравнения ХФР положения двух близко расположенных электронов эквивалентно их положению, когда они удалены. На самом деле вследствие кулоновского отталкивания второе положение предпочтительнее, т.е. существует кулоновская корреляция в движении электронов, не учтенная в уравнении ХФР.

11. Для чего при описании структуры молекулы используют псевдоатомы?

Псевдоатомы используются для описания структуры высокосимметричных молекул с помощью Z-матрицы, что существенно уменьшает число оптимизируемых параметров. Псевдоатомы обозначаются символами X или XX, их может быть любое количество, а располагаться они могут в любой строке Z-матрицы. Псевдоатомы используются программой только для описания структуры, на выполнение расчетов они не влияют.

12. Что такое функции Фукуи и для чего они применяются?

Функцией Фукуи называется производная электронной плотности по числу электронов при фиксированном внешнем потенциале, в котором движутся электроны. Анализ распределения электронной плотности позволяет выявить места повышенной реакции исследуемой молекулы на приближающуюся к ней частицу, т.е. индекс реакционной способности. Это обусловлено тем, что реакция молекулы на приближение к ней нуклеофила или электрофила характеризуется именно изменением электронной плотности. По значению функций Фукуи определяют места атаки молекулы электрофилом, нуклеофилом или радикалом.

Контроль освоения ПК-3.

ПК-3. Закрытые вопросы

1. Какие критерии могут быть использованы для статистической оценки значимости отличий результатов эксперимента (выберите два варианта)?

А критерий Стьюдента

Б Q-критерий

В τ -критерий

Г критерий Фишера

2. Какие статистические критерии используются для проверки гипотезы о принадлежности двух выборок одной генеральной совокупности (выберите два варианта)?

А критерий Фишера

Б критерий 3σ

В критерий Стьюдента

Г асимметрия и эксцесс

3. Распределение Стьюдента позволяет выполнить статистический анализ выборки, объемом не более 30. Верно ли данное утверждение?

Верно

4. Если распределение случайной величины подчиняется нормальному закону (закону Гаусса), то для любой совокупности значений данной величины может быть установлена вероятность попадания ее значений в заданный доверительный интервал с помощью значений функции Лапласа. Верно ли данное утверждение?

Неверно

5. Если распределение случайной величины подчиняется нормальному закону (закону Гаусса), то разброс ее значений относительно математического ожидания не превышает утроенное среднеквадратическое отклонение. Верно ли данное утверждение?

Верно

6. В чем состоят основные принципы многофакторного эксперимента (выберите три варианта)?

А объект исследования представляется как «черный ящик»

Б закономерности, определяющие поведения объекта исследования, выявляются посредством установления изменений параметров при одновременном воздействии различных факторов

В закономерности, определяющие поведения объекта исследования, выявляются посредством установления изменений параметров при поочередном воздействии различных факторов

Г устанавливаются условия/допущения, в которых поведение объекта исследования описывается неэмпирическими уравнениями

Д составление плана эксперимента осуществляется на основании математической модели

7. Согласно методу наименьших квадратов, лучшими оценками коэффициентов уравнения регрессии будут такие, при которых сумма квадратов разности экспериментальных значений и значений, установленных по уравнению, будет минимальна. Верно ли данное утверждение?

Верно

8. Какой основной критерий используют в дисперсионном анализе (выберите один вариант)?

А критерий Фишера

Б критерий Стьюдента

В критерий Пирсона

9. Факторами в дисперсионном анализе могут быть (выберите один вариант).

А количественные характеристики объекта исследования

Б качественные характеристики объекта исследования

В количественные и качественные характеристики объекта исследования

9. Что означает цифра 6 в обозначении базиса 6-311G(d,p)?

А АО внешних электронов включает 6 гауссовых функций

Б АО внутренних электронов включает 6 гауссовых функций

В АО внутренних и внешних электронов включает 6 гауссовых функций

Г нет правильного ответа.

10. Что принято за единицу длины в атомной системе единиц?

А 1 ангстрем

Б среднее расстояние электрона от ядра в атоме водорода

В 1 нм

Г нет правильного ответа.

11. Какие ключевые слова используются для поиска переходного состояния?

А IRC

Б QST2

С QST3

Г нет правильного ответа

12. В каком разделе окна ввода работы программы Gaussian указывается тип выполняемых работ?

А % Section

Б Route section

В Title section

Г нет правильного ответа

13. Какая матрица может быть использована для задания структуры молекулы?

А Z - матрица

Б матрица Гессе

В матрица коэффициентов молекулярных орбиталей

Г нет правильного ответа

14. Какое ключевое слово используется для учета ошибки BSSE?

А IRC

Б Counterpoise

С QST3

Г нет правильного ответа

ПК-3. Комбинированные вопросы

1. Какой критерий может быть использован для проверки выборки на наличие грубых промахов, если объем выборки менее 30?

т-критерий

2. Какой критерий может быть использован для проверки выборки на наличие грубых промахов, если объем выборки менее 10?

Q-критерий

3. Как в хемометрике называют величины, которые задают и/или контролируют в ходе эксперимента?

Факторы

4. Как в хемометрике называют величины, которые измеряют и/или оптимизируют в ходе эксперимента?

Параметры

5. Какой критерий может быть использован для оценки значимости коэффициентов регрессии?

Критерий Стьюдента

6. Какой критерий может быть использован для проверки адекватности регрессии?

Критерий Фишера

7. Как называется линейная комбинация примитивных гауссианов?

Контракция

8. Что называется поверхностью потенциальной энергии?

Зависимость потенциального поля, в котором движутся ядра, от всех независимых геометрических координат молекулы.

9. Что называется приближением изолированной молекулы?

Оценка характеристик переходного состояния на основе особенностей строения исходных веществ называется приближением изолированной молекулы.

10. Какое ключевое слово используется для расчета разностей энергий атомов с помощью различных базисных наборов?

Gen

11. Какое ключевое слово используется для расчета УФ спектра?

TD DFT

ПК-3. Открытые вопросы

1. Изложите принципиальный алгоритм статистического анализа малой выборки (укажите последовательность действий без формул).

Задать уровень значимости (или доверительной вероятности) на котором будет выполнен анализ. Проверить выборку на наличие грубых промахов. Рассчитать среднее значение выборки. Рассчитать стандартное отклонение. Рассчитать доверительный интервал (для расчета доверительного интервала следует использовать табличное значение коэффициента Стьюдента при заданном уровне значимости (или доверительной вероятности) и числе степеней свободы, на единицу меньшей объема выборки). Представить результат эксперимента с учетом правил округления.

2. Изложите принципиальный алгоритм проверки гипотезы о принадлежности нескольких выборок одной генеральной совокупности (укажите последовательность действий без формул).

Задать уровень значимости (или доверительной вероятности) на котором будет выполнен анализ. Проверить выборки на наличие грубых промахов и рассчитать основные параметры выборок (среднее значение, дисперсию). Выполнить статистическое сравнение дисперсий выборок для проверки гипотезы о равенстве дисперсий генеральных совокупностей, которым принадлежат выборки. Выполнить статистическое сравнение средних значений выборок для проверки гипотезы о равенстве математических ожиданий генеральных совокупностей, которым принадлежат выборки. Гипотеза о принадлежности выборок одной генеральной совокупности верна, если и дисперсии, и средние значения выборок различаются незначимо (то есть если верна и гипотеза о равенстве дисперсий генеральных совокупностей, которым принадлежат выборки, и гипотеза о равенстве математических ожиданий генеральных совокупностей, которым принадлежат выборки).

3. Дайте определение понятию корреляции.

Наличие линейной взаимосвязи между двумя количественными характеристиками объекта исследования.

4. В чем состоит задача однофакторного дисперсионного анализа?

Изучение влияния одного фактора (количественного или качественного), который принимает различные уровни (значения или «качества» факторов) на рассматриваемый параметр.

5. Какова задача многофакторного дисперсионного анализа?

Изучение влияния нескольких факторов (количественных или качественных), каждый из которых принимает различные уровни (значения или «качества» факторов), на рассматриваемый параметр для оценки значимости каждого из них.

6. Дайте определение регрессионного анализа.

Установление функциональной зависимости между измеряемыми (или оптимизируемыми) и задаваемым (или контролируемым) количественными характеристиками объекта исследования.

7. Что такое обменная корреляция?

Данный тип корреляции включает синхронизацию движений пар электронов с параллельными спинами, расположенными на разных МО в системах с открытыми оболочками. Два таких электрона слабее отталкиваются друг от друга, чем электроны с антипараллельными спинами, поскольку для параллельных спинов имеет место обменная поправка к отталкиванию, знак которой отрицателен. Поэтому электроны стремятся так скоррелировать свое движение, чтобы электроны с одинаковым спином в среднем были расположены ближе друг к другу, чем электроны с антипараллельными спинами.

8. Что означают символы d,p в базисном наборе 6-31G(d,p)?

Данные символы обозначают включение в базисный набор поляризационных функций, т.е. добавлением p орбиталей при описании атома водорода и d орбиталей для элементов 2 периода.

9. Что означают ключевое слово scrf?

Ключевое слова SCRF (self-consistent reaction field, самосогласованное поле реакции) определяет моделирование свойств систем в растворах. Данное ключевое слово используется вместе с опцией, определяющей метод расчета и растворитель.

10. Как в программе Gaussian рассчитать сродство к электрону?

Сродство к электрону (electron affinity – EA) атомно-молекулярной системы определяется изменением энергии системы при присоединении к ней электрона. Сродство к электрону молекулы представляет собой разность между энергией нейтральной молекулы A и энергией аниона A⁻. Таким образом для расчета сродства к электрону нужно выполнить расчет энергии молекулы и ее аниона. Сродство к электрону определяет окислительную способность частицы. Молекулы с высокими значениями сродства к электрону - сильные окислители, так как наиболее легко присоединяют электроны.

11. Как в программе Gaussian рассчитать энергию ионизации молекулы?

Энергия ионизации молекулы определяется как наименьшая энергия, необходимая для удаления электрона из молекулы. В результате удаления валентного электрона получается катион в основном состоянии. Поэтому для расчета энергии ионизации, нужно выполнить расчет энергии молекулы и ее катиона и найти их разность.

Описание технологии проведения: выполняется в электронной информационно-образовательной среде ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru>).

При прохождении процедур оценки достижения результатов обучения студенту разрешается использование непрограммируемого калькулятора и справочных материалов, предоставляемых Университетом.

Критерии оценивания: отлично – 95-100%, хорошо – 75-80%, удовлетворительно – 55-60%, неудовлетворительно – менее 55%.