



Основная профессиональная образовательная программа  
04.06.01 Химические науки  
(Органическая химия)

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

**ИВАНОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

Кафедра органической и физической химии

ОДОБРЕНО:

Руководитель ОП

(подпись)

Т.П. Кустова

« 4 » 05 20 17 г.

**Рабочая программа дисциплины**

Корреляционный анализ в органической химии

Уровень высшего образования:	Подготовка кадров высшей квалификации
Квалификация выпускника:	Исследователь. Преподаватель-исследователь
Направление подготовки:	04.06.01 Химические науки
Направленность (профиль) образовательной программы:	Органическая химия

Иваново



## **1. Цели освоения дисциплины**

Целью освоения дисциплины "Корреляционный анализ в органической химии" является подготовка аспирантов для научно-исследовательской деятельности, связанной со статистической обработкой результатов эксперимента и установлением корреляционных зависимостей типа "структура – реакционная способность", путем развития у них личностных качеств и формирования общепрофессиональных и профессиональных компетенций в соответствии с ФГОС ВО.

## **2. Место дисциплины в структуре ОП**

Дисциплина "Корреляционный анализ в органической химии" относится к вариативной части ОП и является дисциплиной по выбору. Аспирант, приступающий к изучению дисциплины, должен обладать знаниями, умениями, навыками, полученными ранее в ходе изучения дисциплин: "Органическая химия", "Строение и реакционная способность органических соединений", "Биохимия", "ВМС", "Аналитическая химия" и "Физическая химия".

Для освоения данной дисциплины обучающийся должен:

**Знать:**

основные понятия теоретической органической химии, краткие исторические сведения о развитии органической химии, роль российских ученых в развитии этой науки, место органической химии среди других естественнонаучных дисциплин и ее вклад в развитие современной цивилизации, значение и сферы применения основных классов органических соединений;

меры безопасности при работе с органическими веществами;

номенклатуру основных классов органических соединений, принципы классификации органических соединений, химические свойства и способы получения различных классов органических соединений, механизмы органических реакций, методы решения задач в рамках общего курса органической химии;

основные методы выделения и очистки органических соединений, приборы и оборудование, необходимые для проведения синтезов в лабораторных условиях, аналитические приемы при работе с органическими веществами, методы идентификации органических соединений.

**Уметь:**

обосновано проводить поиск схемы синтеза в химической литературе, выбирать схему синтеза, выделения и очистки органического соединения, использовать теоретические основы дисциплины в объеме, необходимом для решения типовых задач;

готовить и безопасно проводить химический эксперимент по изучению свойств и идентификации различных классов органических веществ;

использовать знание химических свойств органических соединений различных классов для установления связи между ними, описывать свойства органических соединений, используя знание свойств их функциональных группы, составлять схемы и уравнения химических реакций для веществ разных классов;

осуществлять на практике безопасный анализ и идентификацию органических веществ;

обосновывать применение органических веществ в промышленности, проводить исследования в соответствии с профессиональными компетенциями, проводить обработку результатов эксперимента и оценивать их в сравнении с литературными данными.

**Владеть:**

опытом описания и анализа органических превращений на основе представлений о составе, строении и свойствах органических веществ – представителей основных классов органических соединений углеводов, гомофункциональных соединений, гетерофункциональных соединений, гетероциклических соединений;



Основная профессиональная образовательная программа  
04.06.01 Химические науки  
(Органическая химия)

приёмами органического синтеза и физико-химических методов анализа органических соединений;

приёмами безопасной работы в лаборатории органического синтеза.

Успешное освоение дисциплины будет способствовать успешному прохождению в 8-м семестре практики по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности (исследовательской практики).

### **3. Планируемые результаты обучения по дисциплине**

#### **3.1. Компетенции, формированию которых способствует дисциплина**

При освоении дисциплины формируются следующие компетенции в соответствии с ФГОС ВО по данному направлению подготовки:

а) общепрофессиональные (ОПК):

способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);

б) профессиональные (ПК):

готовность использовать современные экспериментальные методы для установления структуры и исследования реакционной способности органических соединений (ПК-1);

способность проектировать и осуществлять направленный синтез органических соединений с полезными свойствами (ПК-2).

#### **3.2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с формируемыми компетенциями**

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

Знать:

современные возможности, области применения и перспективы применения математических и компьютерных методов в органической химии (ОПК-1, ПК-1);

области приложения хемоинформатики (ОПК-1);

теоретические основы корреляционного анализа, корреляционные параметры и их химическую интерпретацию, виды и типы химических корреляций (ОПК-1);

виды и разновидности структурных молекулярных и локальных дескрипторов и их использование (ОПК-1);

теоретические основы количественной теории ЖМКО, принципы определения квантово-химических динамических индексов реакционной способности (ПК-1);

основы математического моделирования и использования математических моделей (ПК-1);

методы использования физико-химических параметров для прогнозирования биологической и фармацевтической активности химических веществ (ПК-1);

теоретические основы и практическое приложение методов QSAR-QSPR (ОПК-1, ПК-1);

принципы организации, интерфейс и способы использования программного обеспечения для визуализации квантовохимических вычислений (ОПК-1);

основы функционирования, организации и методов поиска химической информации в основных химических базах данных (ОПК-1).

Уметь:

прогнозировать физико-химические свойства органических веществ на основе вычислительных данных (ПК-1);

подбирать соответствующие проблеме исследования структурные дескрипторы и индексы реакционной способности (ПК-1);



Основная профессиональная образовательная программа  
04.06.01 Химические науки  
(Органическая химия)

обоснованно проводить выбор подходящих по химическому и физико-химическому смыслу дескрипторов изучаемых структур и рассчитывать эти величины наиболее рациональным способом (ПК-1);

интерпретировать экспериментальные корреляционные зависимости в рамках современных теоретических представлений о взаимосвязи структуры и свойств исследуемых соединений (ОПК-1, ПК-1);

принимать правильные и обоснованные решения по результатам статистического анализа и проверки математических моделей в рамках методов QSAR-QSPR (ПК-1);

правильно и обоснованно интерпретировать математические модели изучаемых процессов (ПК-2).

Владеть:

методами определения физико-химических параметров органических веществ и структур, применяемых для прогнозирования активности этих соединений (ПК-1);

современными квантово-химическими методами расчета параметров химических структур и способами их применения (ПК-1);

методами принятия решений при проверке моделей QSAR-QSPR и методами отбора и интерпретации математических моделей (ОПК-1, ПК-1);

опытом самостоятельного установления корреляционных зависимостей типа "структура – реакционная способность" (ОПК-1, ПК-1, ПК-2).

#### 4. Объем и содержание дисциплины

Объем дисциплины составляет 2 зачетные единицы (72 академических часа).

##### 4.1. Содержание дисциплины по разделам (темам), соотнесенное с видами и трудоемкостью занятий лекционно-семинарского типа

№ п/п	Разделы (темы) дисциплины	Семестр	Виды занятий, их объем (в ак. часах, по очной форме обучения)		Формы текущего контроля успеваемости (по очной форме обучения)  Формы промежуточной аттестации
			Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	
1.	Вводный. Введение в проблематику дисциплины, представление рабочей программы, осмысление требований к организации процесса обучения, самостоятельной работы и форм аттестации	7	2	2	Входная диагностика: тест с последующим обсуждением результатов. Список вопросов, интересующих обучающегося по содержанию дисциплины (сдается в письменном виде)
2.	Современные проблемы применения компьютерных методов в химии. Тенденции развития вычислительной техники	7	2	2 практ. занятие	
3.	Корреляционный анализ. Корреляционные и функциональные зависимости	7	2	2 практ. занятие	
4.	Химические корреляции. Взаимосвязь "структура – свойство"	7	4	4 практ. занятие	Коллоквиум



Основная профессиональная образовательная программа  
04.06.01 Химические науки  
(Органическая химия)

5.	Общие понятия о дескрипторах молекулярной структуры. Типы дескрипторов. Формальные (эмпирические) параметры заместителей и растворителя. Технологии QSAR - QSPR	7	4	4 практ. занятие	Коллоквиум
6.	Количественная теория ЖМКО. Квантово-химические динамические индексы реакционной способности	7	2	2 практ. занятие	
7.	Заключительный. Подведение и анализ промежуточных результатов освоения дисциплины	7	2		
Итого:			18	18	Зачет с оценкой

#### 4.2. Развернутое описание содержания дисциплины по разделам (темам)

##### ***Современные проблемы применения компьютерных методов в химии. Тенденции развития вычислительной техники.***

Современные проблемы применения математических методов в химии. Тенденции развития вычислительной техники и ее применения для информационного поиска, обработки результатов эксперимента и физико-химических исследований. Понятие о статистических методах анализа эксперимента. Случайные, функциональные и стохастические величины и зависимости. Случайные факторы. Истинное значение результата, разброс относительно центра распределения. Использование математической статистики.

##### ***Корреляционный анализ. Корреляционные и функциональные зависимости.***

Корреляционные и функциональные зависимости. Корреляция как соответствие между зависимыми величинами, как следствие закономерной и случайной природы химического эксперимента. Истинный и эмпирический коэффициенты корреляции. Положительная и отрицательная корреляции. Проверка коэффициента корреляции на статистическую значимость. Качество корреляций в химии. Сопоставление коэффициентов корреляции. Множественная линейная корреляция, частные и общие коэффициенты корреляции.

##### ***Химические корреляции. Взаимосвязь "структура – свойство".***

Принципы ПЛСЭ и ППЛ как теоретическая основа корреляционного анализа. Подходы к химическим корреляциям Пальма, связь с разложением функций в ряд Тейлора. Уравнение Гаммета и связанные с ним параметры молекул. Уравнение Бренстеда. Количественный учет влияния растворителя. Компенсационный эффект. Артефакты в корреляционном анализе. Понятие о регрессии. Линейная регрессия. Линеаризация зависимостей в химическом эксперименте и возможные ошибки. Метод наименьших квадратов. Использование стандартных статистических программ ПЭВМ. Дисперсионный анализ. Многопараметрические корреляции, парные и множественные коэффициенты корреляции. Оценка вклада в общую дисперсию погрешностей метода и воздействия условий эксперимента (факторов). Оценка статистической значимости факторов. Взаимодействие параметров. Ранговая корреляция.

##### ***Общие понятия о дескрипторах молекулярной структуры. Типы дескрипторов. Формальные (эмпирические) параметры заместителей и растворителя. Технологии QSAR - QSPR.***

Типы дескрипторов. Формальные (эмпирические) параметры заместителей и растворителя. Понятие о константах заместителей – константы Гаммета, Тафта, полярные электрофильные константы Гаммета – Брауна, стерические константы Чертонна, Хэнкока, Пальма – Коппеля. Числовые характеристики, получаемые в результате моделирования физико-химических свойств



Основная профессиональная образовательная программа  
04.06.01 Химические науки  
(Органическая химия)

химических соединений. Величины, имеющие четкую физико-химическую интерпретацию. Липофильность (LogP), молярная рефракция (MR), молекулярный вес (MW), дескрипторы водородной связи, молекулярные объёмы и площади поверхностей.

Атомные электроотрицательности, заряды на атомах, заселенности граничных орбиталей, групповые заряды и электроотрицательности. Характеристики доноров и акцепторов водородных связей. Энергии граничных орбиталей по Фукуи (HOMO, LUMO). Атомные заряды. Схемы определения атомных зарядов по Малликену, Левдину, AIM (метод Бейдера), NBO, Хиршфельду, APT, Мерцу – Кольману. Достоинства и недостатки схем разделения зарядов и заселенностей. Уровни теории при определении квантово-химических дескрипторов и достаточная степень сложности расчета. Определение порядков связей, супер- и сверхделокализуемости, энергии катионной, анионной и радикальной локализации, дипольного и высших мультипольных моментов распределения электростатического потенциала. Основы подбора физико-химических параметров для использования в прогнозировании. Общие понятия QSAR–QSPR. Методы корреляции. Классический QSAR. Метод Ганча. Тренировочные и рабочие выборки. Представление о корреляционных зависимостях и функциях. Линейные и нелинейные модели и корреляционные параметры, проверка корреляционных зависимостей на адекватность, проверка и сопоставление коэффициентов корреляции на значимость и однородность. Понятие о статистических методах, применяемых в QSAR. Статистические критерии: коэффициент корреляции R, стандартное отклонение s, критерий Фишера F. Множественная линейная регрессия, пошаговая регрессия, переборные варианты пошаговой регрессии, методы группового учета аргументов, генетические алгоритмы, методы отбора дескрипторов, разбиение выборки на обучающую и контрольную, проблема формирования обучающей выборки. Факторный анализ.

***Количественная теория ЖМКО. Квантово-химические динамические индексы реакционной способности.***

Теоретические основы количественной теории ЖМКО и использования динамических индексов реакционной способности. Электронный химический потенциал, жесткость, мягкость, электрофильность. Глобальные и локальные величины. Функции Фукуи. Влияние уровня теории, растворителя, типа и механизма реакции. Принцип максимальной жесткости и минимальной электрофильности. Выбор коррелируемых параметров в зависимости от типа взаимодействия и селективности реакции.

## **5. Образовательные технологии**

При проведении занятий используются образовательные технологии:

- ✓ технология проблемного обучения,
- ✓ технология развития критического мышления,

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине: технологии смешанного обучения.

## **6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся**

Самостоятельная работа обучающихся в рамках курса «Корреляционный анализ в органической химии» заключается в подготовке к коллоквиумам и к практическим занятиям с использованием методических указаний, расположенных на сайте библиотеки ИвГУ (электронная библиотека):

[http://lib.ivanovo.ac.ru/elib/dl/biology/metod/krilov\\_2011\\_2.htm](http://lib.ivanovo.ac.ru/elib/dl/biology/metod/krilov_2011_2.htm).

Полностью весь методический материал по обеспечению самостоятельной работы студентов приводится в Приложении 1 к РП.



## **7. Характеристика оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине**

Предусмотрены коллоквиумы по базовым разделам курса, собеседования по материалам периодических изданий, выбранным для самостоятельного изучения.

Форма промежуточной аттестации – зачет с оценкой. Форма проведения зачета: представление и защита портфолио компетенций аспиранта, подтверждающего развитие ОПК и ПК в соответствии с ФГОС ВО соответствующего направления подготовки.

Типовые варианты заданий для зачёта представлены в фонде оценочных средств (Приложение 2).

## **8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины**

Основная литература:

1. Самуилов, Я.Д. Реакционная способность органических соединений : учебное пособие / Я.Д. Самуилов, Е.Н. Черезова ; Министерство образования и науки РФ, Федеральное агентство по образованию, Государственное образовательное учреждение Высшего профессионального образования Казанский государственный технологический университет. - Казань : Издательство КНИТУ, 2010. - 430 с. : ил., табл., схем. - Библиогр. в кн.. - ISBN 978-5-7882-0941-8 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=259047>

2. Устынюк, Ю.А. Лекции по органической химии / Ю.А. Устынюк. - Москва : Техносфера, 2015. - Ч. 1. Вводный концентр. - 504 с. : ил., табл., схем. - (Мир химии). - Библиогр. в кн.. - ISBN 978-5-94836-430-8 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=444861>

3. Васильков, Б. Корреляционный анализ / Б. Васильков. - М. : Лаборатория книги, 2010. - 48 с. - ISBN 978-5-905835-85-8 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=97154>

Дополнительная литература:

1. Ким, А.М. Органическая химия : учебное пособие / А.М. Ким ; Министерство образования Российской Федерации, Новосибирский Государственный Педагогический Университет. - 4-е изд., испр. и доп. - Новосибирск : Сибирское университетское издательство, 2004. - 848 с. - ISBN 5-94087-156-9 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=57255>

2. Денисов, В.Я. Стереохимия органических соединений : учебное пособие / В.Я. Денисов, Д.Л. Мурышкин, Т.Н. Грищенко. - 2-е изд., испр. и доп. - Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2013. - 228 с. - ISBN 978-5-8353-1526-0 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232336>

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

Система электронной поддержки образовательного процесса «Мой университет»  
<https://uni.ivanovo.ac.ru>

Профессиональные базы данных и информационно-справочные системы:

ЭБС «Университетская библиотека онлайн» [www.biblioclub.ru](http://www.biblioclub.ru)

Электронная библиотека ИвГУ <http://lib.ivanovo.ac.ru>

Электронный каталог НБ ИвГУ <http://lib.ivanovo.ac.ru/index.php/ek>

Международные реферативные базы данных:

WoS Сублицензионный договор № WoS/280 "02" апреля 2018 г. (до 31.12.2018 г.)





Основная профессиональная образовательная программа  
04.06.01 Химические науки  
(Органическая химия)

---

Springer, Nature: Исходящее письмо от РФФИ от 21/09/2017 №857. Ответное письмо ИВГУ на бланке от 27.09.2017 №16-784. Доступ с 01/01/2018: Springer Journals, Springer Protocols, Springer Materials, Springer Reference, Nature Journals.

Программное обеспечение: операционная система Microsoft Windows, пакет офисных программ Microsoft Office и(или) LibreOffice, интернет-браузер Microsoft Edge и(или) Yandex Browser, система электронной поддержки образовательного процесса «Мой университет» <https://uni.ivanovo.ac.ru>, HyperChem, Firefly.

### **9. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

Учебные аудитории:

- для проведения занятий лекционного типа с комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения, служащими для предоставления учебной информации большой аудитории;
- для проведения занятий семинарского типа, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации с комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения;

Лаборатория, оснащенная лабораторным оборудованием, комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения.

Помещение для самостоятельной работы, оснащенное комплектом специализированной учебной мебели, компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в ЭИОС.

Демонстрационное оборудование и учебно-наглядные пособия для занятий лекционного типа, обеспечивающие тематические иллюстрации: модели, макеты, демонстрационные устройства; печатные пособия (таблицы, схемы).







Основная профессиональная образовательная программа  
04.06.01 Химические науки  
(Органическая химия)

**Авторы рабочей программы дисциплины:** профессор кафедры органической и физической химии, доктор химических наук Крылов Е.Н.; заведующая кафедрой органической и физической химии, доктор химических наук, профессор Кустова Т.П.

Программа рассмотрена и утверждена на заседании кафедры органической и физической химии « 4 » 05 20 17 г., протокол № 9

Программа обновлена  
протокол заседания кафедры № 10 от « 17 » 05 20 18 г.  
Согласовано:  
Руководитель ОП  Т.П. Кустова  
(подпись)

Программа обновлена  
протокол заседания кафедры № 1 от « 30 » 08 20 19 г.  
Согласовано:  
Руководитель ОП  Т.П. Кустова  
(подпись)