



Основная профессиональная образовательная программа
04.04.01 Химия
(Инноватика в химии и химическом образовании)

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ИВАНОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Кафедра фундаментальной и прикладной химии

ОДОБРЕНО:

Руководитель ОП

Т.П. Кустова

(подпись)

« 01 » 09 20 21 г.

Рабочая программа дисциплины

Компьютерное моделирование и структурная химия

Уровень высшего образования:	магистратура
Квалификация выпускника:	магистр
Направление подготовки:	04.04.01 Химия
Направленность (профиль) образовательной программы:	Инноватика в химии и химическом образовании



1. Цели освоения дисциплины

Целями дисциплины являются:

- расширение представлений о современной теоретической химии, современных методах квантово-химических расчетов, а также о понятиях: структура молекул, типы структурной нежесткости, внутримолекулярные перегруппировки;
- расширение представлений теоретической химии в рамках качественных орбитальных теорий, разработанных для определенных классов химических соединений,
- приобретение знаний, умений и навыков для самостоятельного исследования свойств молекулярных систем (с том числе конформационных свойств молекулярных систем, имеющих нежесткие координаты) и решения теоретических задач химии, а также для применения приобретенных навыков в научно-исследовательской, научно-производственной и педагогической деятельности.

2. Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина «Компьютерное моделирование и структурная химия» относится к обязательной части образовательной программы (обязательная дисциплина).

Дисциплина «Компьютерное моделирование и структурная химия» базируется на знаниях, умениях и навыках, приобретенных студентами в ходе изучения базовых дисциплин программ ВО химического профиля: «Квантовая механика и квантовая химия», «Математика», «Физика», «Строение вещества», «Компьютерная химия», «Неорганическая химия», «Органическая химия», а также в ходе изучения дисциплин «Компьютерные технологии в науке и образовании» и «Гетероциклические и полиароматические органические соединения».

Знания, полученные при изучении дисциплины «Компьютерное моделирование и структурная химия», могут быть использованы студентами при изучении таких предметов, как «Супрамолекулярная химия», «Приоритетные направления развития химии в XXI веке», «Жидкокристаллические материалы», а также при прохождении производственной практики, научно-исследовательской работы, производственной практики, преддипломной практики.

Для освоения данной дисциплины обучающийся должен:

Знать:

- основы квантовой механики и квантовой химии, приближения, используемые при решении уравнения Шредингера для молекул

Уметь:

- выполнять расчеты геометрического строения, частот колебаний и электронных характеристик молекул полуэмпирическими методами с помощью программы HyperChem.

Иметь:

- практические навыки выполнения квантово-химических расчетов с помощью программ HyperChem, анализа результатов расчетов, который включает рассмотрение геометрического строения молекул, их колебательных спектров, молекулярного объема, диаграмм МО, энергии ионизации, зарядов на атомах, дипольных моментов.

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:

б) общепрофессиональные (ОПК):



Основная профессиональная образовательная программа
04.04.01 Химия
(Инноватика в химии и химическом образовании)

способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения (ОПК-1)

способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук (ОПК-2)

способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности (ОПК-3)

3.2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с индикаторами достижения формируемых компетенций

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

Знать: основы квантовой механики и квантовой химии для критического анализа литературных данных и результатов собственного исследования (ОПК-1); современные методы квантово-химических расчетов и методики интерпретации их результатов для разнообразных классов химических соединений (ОПК-3); основные особенности и возможности современных программ для квантово-химических расчетов, способы и методы поиска информации в электронных базах NIST, SDBS, BSE и банке кристаллографических данных CCDC (ОПК-1); методику составления плана исследований на основе анализа литературы по сформулированной тематике, методику выбора вариантов расчетов для квантово-химического исследования (ОПК-2, ОПК-3)

Уметь: анализировать научную литературу с целью выбора направления исследования по предлагаемой теме (ОПК-2), использовать сравнительный метод для установления корреляций между молекулярными дескрипторами в ряду сходственных соединений, выполнять расчеты геометрического строения, частот колебаний и электронных характеристик молекул квантово-химическими методами разного уровня, описывать полученные результаты и найденные закономерности, формулировать выводы, применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов (ОПК-1, ОПК-3).

Иметь: навыки анализа научной литературы с целью выбора направления исследования по предлагаемой теме, использовать сравнительный метод для установления корреляций между молекулярными дескрипторами в ряду сходственных соединений (ОПК-1, ОПК-3), навыки исследования свойств молекулярных систем методами квантовой механики и квантовой химии при решении теоретических задач химии (ОПК-3), навыки выполнения расчетов геометрического строения, частот колебаний и электронных характеристик молекул квантово-химическими методами разного уровня (ОПК-1, ОПК-3); навыки краткого и развернутого описания результатов теоретического исследования, выявленных закономерностей и особенностей в рядах исследуемых соединений (ОПК-1, ОПК-2).

4. Объем и содержание дисциплины

Объем дисциплины составляет 11 зачетных единиц, 396 часов.

В первом семестре – 3 зачетные единицы, 108 часов, зачет

во втором семестре – 4 зачетные единицы, 144 часа, зачет с оценкой

в третьем семестре – 4 зачетные единицы, 144 часа, экзамен

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

Объем иной контактной работы и самостоятельной работы обучающегося по дисциплине указан в учебном плане образовательной программы.



Основная профессиональная образовательная программа
04.04.01 Химия
(Инноватика в химии и химическом образовании)

№ п/ п	Разделы (темы) дисциплины	Семестр	Виды занятий, их объем		Формы текущего контроля успеваемости Формы промежуточной аттестации
			Занятия лекцион- ного типа	Занятия семинар- ского типа	
1.	Методы квантово-химических расчетов. Метод Хартри-Фока. Способы решения уравнения ХФР.	1	6	4	Отчет по лабораторной работе 1.
2.	Ab initio методы, учитывающие электронную корреляцию. Метод функционала плотности.	1	4	4	Отчет по лабораторной работе 2.
3.	Основные концепции и способы расчетов.	1	4	4	Отчет по лабораторной работе 3.
	Итого за семестр		14	12	Зачет
1.	Симметрия в химии.	2	2	2	Отчет по лабораторной работе 1.
2.	Принципы качественной теории молекулярных орбиталей.	2	2	2	Отчет по лабораторной работе 2.
3.	NBO-анализ распределения электронной плотности в молекуле.	2	4	4	Отчет по лабораторной работе 3.
4.	Индивидуальное научно-исследовательское задание	2	6	4	Отчет-презентация
	Итого за семестр:		14	12	Зачет с оценкой
1.	Развитие представлений о геометрической конфигурации молекул.	3	2	2	Отчет по лабораторной работе 1.
2.	Виды структурной нежесткости.	3	4	4	Отчет по лабораторным работам 2-3.
3.	Квантово-химическое исследование структурной нежесткости органических молекул.	3	6	4	Отчет по научно-исследовательской работе.
	Итого за семестр:		12	10	Экзамен
	Итого по дисциплине:		40	34	

4.2. Развернутое описание содержания дисциплины по разделам (темам)
Структура и содержание теоретической части

Таблица 1.



Основная профессиональная образовательная программа
04.04.01 Химия
(Инноватика в химии и химическом образовании)

№ раздела	Основное содержание лекций
	1 семестр
1	Раздел 1. Методы квантовохимических расчетов. Уравнение Шредингера для молекул. Гамильтониан. Приближение Борна-Оппенгеймера. Метод Хартри-Фока. Спин-МО. Многоэлектронная волновая функция. Метод МО-ЛКАО. Вариационный принцип. Уравнение Хартри-Фока-Рутаана. Метод самосогласованного поля.
2	Раздел 2. Способы решения уравнения ХФР. Ограниченный и неограниченный методы ХФ. Ограниченный метод ХФ для открытых оболочек. Полуэмпирические и неэмпирические методы. Использование и ограничения полуэмпирических методов. Решение уравнения ХФР неэмпирическими методами. Базисы АО. Минимальный базис, валентно расщепленный базис, поляризационные и диффузные функции, базисы атомов пост-третьего периода, корреляционно-согласованные базисы. ХФ предел. Эффективные остовные потенциалы.
3	Раздел 3. Ab initio методы, учитывающие электронную корреляцию - пост-ХФ методы. Метод конфигурационного взаимодействия. Метод связанных кластеров. Метод многочастичной теории возмущений.
4	Раздел 4. Метод функционала плотности. Обменные и корреляционные функционалы. Гибридные методы.
5	Раздел 5. Основные концепции и способы расчетов. Ограничения и относительная точность разных квантово-химических методов. Программы для квантово-химических расчетов и визуализации результатов расчетов.
	2 семестр
1	Раздел 1. Симметрия в химии. Операции и элементы симметрии молекул. Оси и плоскости симметрии, центр симметрии. Зеркально-поворотные и поворотно-инверсионные оси. Точечные группы симметрии молекул. Типы точечных групп. Таблицы характеров. Типы симметрии. Классификация нормальных колебаний по типам симметрии. Правила отбора в колебательных спектрах. Классификация канонических молекулярных орбиталей по типам симметрии. Влияние симметрии равновесной конфигурации ядер на свойства молекул и их динамическое поведение (дипольный момент, моменты инерции, формы нормальных колебаний и т.п.)
2	Раздел 2. Принципы качественной теории молекулярных орбиталей. Углубленное рассмотрение. Взаимодействие двух и нескольких орбиталей. Орбитали связей и групповые орбитали. Локализованные МО. Концепция гибридных атомных орбиталей. Гибридизация и пространственная направленность химических связей. Неэквивалентные гибридные орбитали. Орбитали циклических систем. Орбитали металлоорганических фрагментов.



Основная профессиональная образовательная программа
04.04.01 Химия
(Инноватика в химии и химическом образовании)

3	<p>Раздел 4. Строение координационных соединений. Координационная связь. Типы координационных полиэдров. Теория кристаллического поля. Качественные аспекты теории. Расщепление энергии d-АО в полях различной симметрии. Величина расщепления термов. Комплексы слабых и сильных полей. Спектроскопический ряд лигандов. Энергия стабилизации кристаллическим полем. Объяснение изменений термодинамических, магнитных и других свойств в рядах соединений переходных элементов с позиций теории кристаллического поля.</p> <p>Теория поля лигандов. Применение теории молекулярных орбиталей для описания электронного строения координационных соединений. МО координационных соединений с лигандами, имеющими σ-МО. МО координационных соединений с лигандами, имеющими σ-МО и π-МО. π-Комплексы и металлоцены. Правило 18 электронов. Деформация координационных полиэдров и эффекты Яна-Теллера.</p>
4	<p>Раздел 5. NBO-анализ распределения электронной плотности в молекуле. Анализ заселенностей АО. Заряды на атомах. Электронная конфигурация атома в молекуле. Порядки связей. «Валентность» атома в молекуле. Естественные МО. Их состав. Гибридизация АО и двухцентровые двухэлектронные МО. Орбитальные эффекты, стабилизирующие определенную конфигурацию молекулы. Энергия орбитальных взаимодействий.</p>
	3 семестр
1	<p>Раздел 1. Развитие представлений о геометрической конфигурации молекул. Жесткие молекулы. Геометрические параметры молекул. Малые колебания ядер вблизи положения равновесия.</p> <p>Структурно нежесткие молекулы. Колебания с большими амплитудами. Потенциальные поверхности нежестких молекул. Стационарные точки на ППЭ. Барьеры внутримолекулярных превращений.</p>
2	<p>Раздел 2. Виды структурной нежесткости. Поворотная изомерия и внутреннее вращение в молекулах. Потенциальная функция и барьер внутреннего вращения. Конформационный анализ цвиттер-ионной формы молекул глицина и аланина.</p>
3	<p>Раздел 3. Квантово-химическое исследование структурной нежесткости. Расчет потенциальных функций внутримолекулярных перегруппировок. Определение числа конформеров, их относительной энергии и константы конформационных равновесий. Определение энергии и геометрического строения переходного состояния. Выявление причин, стабилизирующих строение конформеров.</p>

5. Образовательные технологии

При реализации дисциплины «Компьютерное моделирование и структурная химия» используются:

- проектная технология;
- рейтинговая технология;
- технология развития критического мышления;
- технология учебной дискуссии;
- проблемное обучение.

Информационные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине:

- технологии смешанного обучения.



Основная профессиональная образовательная программа
04.04.01 Химия
(Инноватика в химии и химическом образовании)

Лабораторные занятия: **активно-деятельный подход** к обучению студентов по дисциплине «Компьютерное моделирование и структурная химия» реализуется в индивидуальном выполнении практических заданий, по тематике, совпадающей с материалом лекций.

Все практические задания выполняются с использованием ПК и программ для квантово-химических расчетов HyperChem, Gaussian и программой визуализации результатов квантово-химических расчетов ChemCraft. Отчеты сдаются студентами в электронном виде. После выполнения всех практических заданий студент в первом семестре самостоятельно выполняет зачетное задание, которое включает все рассмотренные в лекциях вопросы, и использует навыки, приобретенные при выполнении практических заданий. Отчет по зачетному заданию оформляется в виде презентации.

Во втором семестре после выполнения всех практических заданий студент выполняет научно-исследовательский проект, оформляет его результаты в виде расчетной части к квалификационной работе, а также тезисов докладов и презентации. К экзамену студенты оформляют результаты работы над индивидуальным заданием, в котором применяют все изученные методики.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

При самостоятельной работе (СРС) обучающимся предлагается использовать материалы лекций, литературу из доступных электронно-библиотечных систем и различных электронных ресурсов. Текущая и опережающая СРС, направленная на углубление и закрепление знаний, а также развитие практических умений заключается в:

- работе обучающихся с лекционным материалом, поиск и анализ литературы и электронных источников информации по заданной проблеме;
- подготовке отчетов к лабораторным работам;
- подготовке к отчету-презентации к зачетному заданию;
- подготовке к экзамену.

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

В качестве оценочных средств для проведения текущего контроля выступают: Требования к представлению отчетов по практическим работам и индивидуальному заданию.

В качестве итогового контроля в **первом и втором семестре** используется отчет в виде презентации, в которой представлены результаты зачетного задания.

Критерии и шкала оценки:

- оценка «зачет» выставляется студенту при наличии отчетов по практическим работам и успешного выступления с презентацией результатов зачетного индивидуального задания.

В качестве оценочных средств для проведения текущего контроля **во втором семестре** выступают: Требования к представлению отчетов по практическим работам. Вопросы и практические задания к экзамену.

В качестве итогового контроля используется отчет в виде тезисов доклада и презентация, в которой представлены результаты зачетного индивидуального задания, а также ответы на вопросы (из списка вопросов к экзамену).

- оценка «отлично» выставляется студенту, если все предъявляемые требования выполнены;



Основная профессиональная образовательная программа
04.04.01 Химия
(Инноватика в химии и химическом образовании)

- оценка «хорошо» выставляется студенту, если большинство предъявляемых требований выполнена;
- оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если предъявляемые требования выполнены частично;
- оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, если предъявляемые требования не выполнены или большинство требований не выполнено.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

А) Основная литература:

1. Ведринский Р.В. Квантовая механика [Электронный ресурс] : учебник / Ведринский Р.В. – Ростов н/Д: ЮФУ, 2009 – 384 с. Режим доступа:
<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=240937>
2. Ефремов Ю.С. Квантовая механика [Электронный ресурс] : учебное пособие / Ефремов Ю.С. – М.-Берлин: Директ-Медиа, 2015. – 457 с. Режим доступа:
<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=273446>
3. Крашенинин В.И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам [Электронный ресурс] : учебное пособие / Крашенинин В.И. , Газенаур Е.Г. , Кузьмина Л.В. – Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2012. – 56 с. Режим доступа:
<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678>
4. Гиричева Н. И., Федоров М. С. Избранные главы квантовой химии : учеб. пособие / Н. И. Гиричева, М. С. Федоров. – Иваново : Иван. гос. унт, 2021. – 108 с. ISBN 9785780713555
Режим доступа:
http://lib.ivanovo.ac.ru:81/elib/dl/biology/ucheb/giricheva_2021.htm/view

Дополнительная литература:

1. Магазинников, А.Л. Введение в квантовую механику: учебное пособие / А.Л. Магазинников, В.А. Мухачёв. - Томск: Эль Контент, 2010. - 112 с.: ил.,табл., схем. - ISBN 978-5-4332-0046-3; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=208685>
2. Карлов, Н.В. Начальные главы квантовой механики / Н.В. Карлов, Н.А. Кириченко. - Москва: Физматлит, 2006. - 360 с. - ISBN 5-9221-0538-8; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=68397>

Б) программное обеспечение и Интернет-ресурсы

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

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

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

Кембриджская база данных онлайн <https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures/> и оффлайн

База спектральных данных SDBS https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/cre_index.cgi

База данных NIST <https://webbook.nist.gov/chemistry/>

Программное обеспечение: операционная система Microsoft Windows, пакет офисных программ Microsoft Office (Libre Office), интернет-браузер Yandex Browser.

- программа Origin для построения графиков функций и выполнения МНК-анализа
- программы для расчета геометрических и электронных характеристик молекул HyperChem и Gaussian



Основная профессиональная образовательная программа
04.04.01 Химия
(Инноватика в химии и химическом образовании)

- программа для визуализации результатов квантово-химических расчетов ChemCraft
- программа для математических расчетов и моделирования PTC MathCAD Prime
- файловый менеджер FAR manager

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;

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: демонстрационное оборудование (модели, макеты, электронные пособия (презентации)).



Основная профессиональная образовательная программа
04.04.01 Химия
(Инноватика в химии и химическом образовании)

Авторы рабочей программы дисциплины: к.х.н., доц. кафедры фундаментальной и прикладной химии Федоров М.С.; д.х.н., профессор Гиричева Н.И.

Программа рассмотрена и утверждена на заседании кафедры фундаментальной и прикладной химии 31 августа 2021 г., протокол № 1.

Программа обновлена

протокол заседания кафедры № от "___" _____ 20__ г.

Согласовано:

Руководитель ОП _____ Т.П. Кустова
(подпись)