Минобрнауки России

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»

Кафедра химии

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

ДИСЦИПЛИНЫ

«Б1.Д.В.11 Компьютерная химия»

Уровень высшего образования

СПЕЦИАЛИТЕТ

Специальность
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
(код и наименование специальности)

Аналитическая химия
(наименование направленности (профиля)/специализации образовательной программы)

Квалификация
Химик. Преподаватель химии

Форма обучения
Очная

Год набора 2022

Рабочая программа дисциплины «*Б1.Д.В.11 Компьютерная химия*» рассмотрена и утверждена на заседании кафедры

Кафедра химии
наименование кафедры

протокол № 5 от "17" 01 2022.

Заведующий кафедрой
Кафедра химии — подпись — Е.В. Сальникова
наименование кафедры *подпись* *расшифровка подписи*

Исполнители:
Доцент — подпись — С.А. Пешков
должность *подпись* *расшифровка подписи*

должность *подпись* *расшифровка подписи*

СОГЛАСОВАНО:
Председатель методической комиссии по специальности
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия — Е.В. Сальникова
код наименование *личная подпись* *расшифровка подписи*

Заведующий отделом комплектования научной библиотеки
личная подпись Н.Н. Бигалиева
расшифровка подписи

Уполномоченный по качеству факультета
личная подпись А.Н. Сизенцов
расшифровка подписи

№ регистрации _____

© Пешков С.А., 2022
© ОГУ, 2022

1 Цели и задачи освоения дисциплины

Цель освоения дисциплины «Компьютерной химия» является формирование профессиональной компетентности выпускника, получение студентами знаний о постановке задачи и реализации научной, творческой работы на основе исследований механизмов химических реакций и каталитических процессов в органической, неорганической аналитической химии и биохимии. Используя современные знания полуэмпирических и неэмпирических методов квантовой химии, а также способы обработки результатов расчетов, выявить связи между распределением электронной и спиновой плотности и структурой переходного состояния (каталитического центра) нанообъектов; научиться оценивать изменения химических и физико-химических свойств молекул и комплексов при протекании химических реакций, на основе принципов, положенных в основу квантовой механики.

Задачи:

1) теоретический компонент:

- посредством самостоятельного изучения научной литературы и консультаций преподавателя, а также слушания, конспектирования и реферирования изучить информацию о рассматриваемой химической (каталитической, ферментативной) реакции;
- знать сущность, используемых квантовохимических методов, при исследовании различных типов реакций и процессов в химии;
- владеть основами анализа расчетов;

2) познавательный компонент:

- понимать роль теоретического анализа;
- иметь представление об особенностях исследуемых объектов;
- владеть методологией выбора методов расчета и используемых базисов;

3) практический компонент:

- уметь с пользой применять знания по квантовой химии на практике;
- освоить современные методы расчета электронной структуры веществ в газовой, жидкой твердой фазах и уметь их применять для конкретных практических задач.

2 Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к обязательным дисциплинам (модулям) вариативной части блока Д «Дисциплины (модули)»

Пререквизиты дисциплины: *Б1.Д.Б.13 Информатика, Б1.Д.Б.14 Информационные технологии и программирование, Б1.Д.Б.28 Квантовая химия*

Постреквизиты дисциплины: *Б2.П.В.П.3 Научно-исследовательская работа*

3 Требования к результатам обучения по дисциплине

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих результатов обучения

Код и наименование формируемых компетенций	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций
ПК*-1 Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области	ПК*-1-В-1 Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий ПК*-1-В-2 Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения	**Знать:** - основные принципы, законы, методологию изучаемых химических дисциплин

Код и наименование формируемых компетенций	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций
химии, химической технологии или смежных с химией науках	поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	- теоретические основы физических и физико-химических методов исследования **Уметь:** - использовать фундаментальные химические понятия в своей профессиональной деятельности **Владеть:** - техническими средствами, документацией и методами испытаний для решения поставленных задач, в том числе НИР

4 Структура и содержание дисциплины

4.1 Структура дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы (108 академических часов).

Вид работы	Трудоемкость, академических часов	
	5 семестр	всего
Общая трудоёмкость	**108**	**108**
Контактная работа:	**84,25**	**84,25**
Лекции (Л)	34	34
Лабораторные работы (ЛР)	50	50
Промежуточная аттестация (зачет, экзамен)	0,25	0,25
Самостоятельная работа: *- самоподготовка (проработка и повторение лекционного материала и материала учебников и учебных пособий;* *- подготовка к лабораторным занятиям;* *- подготовка к рубежному контролю и т.п.)*	**23,75**	**23,75**
Вид итогового контроля (зачет, экзамен, дифференцированный зачет)	**зачет**	

Разделы дисциплины, изучаемые в 5 семестре

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		всего	аудиторная работа			внеауд. работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	Приближения в квантовой химии.	24	8		12	4
2	Квантово-химические методы расчета электронной структуры.	53	13		30	10

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		всего	аудиторная работа			внеауд. работа
			Л	ПЗ	ЛР	
3	Построение, расчет и выбор пакета программ для квантово-химического моделирования	31	13		8	10
	Итого:	108	34		50	24
	Всего:	108	34		50	24

4.2 Содержание разделов дисциплины

№ 1 Приближения в квантовой химии.

Одноэлектронное приближение (детерминант Слейтера), вариационный принцип (вывод секулярных уравнений). Вычисление АО в одноэлектронном приближении. Метод ВС. Молекула и химическая связь. Метод МО. Симметрия и диаграмма МО 2-х атомных гомоядерных молекул. Молекулярные параметры.

№ 2 Квантово-химические методы расчета электронной структуры.

Метод Рутаана. Метод Хартри-Фока-Рутана. Методы ЧПДП и МЧПДП. Приближение МЧПДП/3 (MINDO/3). Метод Хюккеля. Индексы электронной структуры. Уравнения Хартри-Фока. Метод самосогласованного поля (ССП). Уравнения Рутаана. Теория функционала плотности и её модификации. Метод конфигурационного взаимодействия (КВ). Полуэмпирические и неэмпирические методы квантовой химии.

№3 Построение, расчет и выбор пакета программ для квантово-химического моделирования

Бесплатные программные продукты GAMESS, FireFly, Dalton, ChemCraft. Коммерческие проекты GAUSSIAN, Q-CHEM, HyperChem. Входной файл, ключевые коды. Учет симметрии молекулы. Базисные наборы и суперпозиционная ошибка. Учет сольватационных эффектов. Моделирование низкомолекулярных и сложных систем. Комбинированные методы квантовой химии. Термодинамическая задача. Матрица Гессе.

4.3 Лабораторные работы

№ ЛР	№ раздела	Наименование лабораторных работ	Кол-во часов
1		Правила техники безопасности и техника выполнения лабораторных работ.	2
2	1,2	Знакомство с программами. Построение молекул. Эмпирические, полуэмпирические и неэмпирические методы исследования электронной структуры молекул.	4
3	2,3	Расчет входных параметров. Оптимизация молекулы методами ab initio. Построение сечения ППЭ.	4
4	2,3	Расчет термодинамической задачи. Визуализация и разбор атомных орбиталей.	2
5	2	Термодинамика химических процессов.	4
6	2	Сравнение эмпирических и полуэмпирических методов с методами ab initio. Выбор базисного набора.	4
7	2	Метод теории функционала плотности. Выбор функционала плотности.	4
8	2,3	Моделирование низкомолекулярных систем. Электростатический потенциал и электронная плотность. Заряд на атомах	4
9	3	Суперпозиционная ошибка базисного набора.	2
10	3	Выбор модели учета сольватационных эффектов	2
11	3	Комбинированные методы квантовой химии QM/MM+	4
12	3	Комбинированные методы квантовой химии ONIOM	4

№ ЛР	№ раздела	Наименование лабораторных работ	Кол-во часов
13	2,3	Методы конфигурационного взаимодействия и МКССП	2
14	2,3	Построение энергетических термов методами КВ	2
15	2,3	Построение энергетических термов методами МКССП (MCSCF)	2
16	2,3	Применение других методов квантовой химии к химическим системам (DFT-D, TD-DFT, CASSCF)	2
17		Решение задач.	2
		Итого:	50

5 Учебно-методическое обеспечение дисциплины

5.1 Основная литература

1. Стромберг А.Г., Семченко Д.П. Физическая химия: учеб. для хим. спец. вузов / А. Г. Стромберг, Д. П. Семченко.- 7-е изд., стер. - М. : Высш. шк., 2009. - 528 с.

2. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособие для вузов / А. И. Ермаков. - М. : Юрайт, 2010. - 556 с.

1. Пешков, С. А. Теоретические основы квантовой и физической химии [Электронный ресурс] : учебное пособие для обучающихся по программам высшего образования по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, и по направлению подготовки 04.03.01 Химия / С. А. Пешков; М-во науки и высш. образования Рос. Федерации, Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. образования "Оренбург. гос. ун-т". - Электрон. дан. - Оренбург : ОГУ, 2021

5.2 Дополнительная литература

1. Степанов Н.Ф, Квантовая механика и квантовая химия М.: Мир, Изд. МГУ 2001. 519 с.

2. Мелешина А.М. Курс квантовой механики для химиков: Учеб. пособие, 2-е изд., пере- раб. и доп. М.: Высш. шк., 1980, 215 с.

3. Соколов А.А., Тернов И.М., Жуковский Б.Ч. Квантовая механика. М.: Наука, 1979. 528 с.

4. Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия [Текст] : учебное пособие / В. И. Барановский.- 2-е изд., испр. и доп. - Санкт-Петербург : Лань, 2022. - 427 с. : ил. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - Прил.: с. 407-420. - Библиогр.: с. 421. - ISBN 978-5-8114-2340-8.

5.3 Периодические издания

1. Успехи химии: журнал. - М.: Агентство "Роспечать".
2. Кинетика и катализ: журнал. - М.: Агентство "Роспечать".
3. Известия РАН, сер. Химическая: журнал. - М.: Агентство "Роспечать".
4. Доклады академии наук (ДАН) : журнал. - М.: Агентство "Роспечать".
5. Журнал неорганической химии: журнал. - М.: АРСМИ
6. Журнал физической химии. - М.: Агентство "Роспечать".

5.4 Интернет-ресурсы

1. Сайт Гигапедия. Книги по химии на английском языке; книги по квантовой химии, спектроскопии djvu-inf.narod.ru/nclib.html
2. База данных о рентгеноструктурном анализе соединений и атомных термах NIST www.nist.gov > PML > Publications
3. Quantum Chemistry with Wavefunction Spartan www.computational-chemistry.co.uk
4. Quantum Chemistry Software - MOLCAS www.molcas.org/introduction.html
5. Официальный сайт А.А. Грановского http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html

6. Научная электронная библиотека - http://elibrary.ru/defaultx.asp.
7. Электронная библиотека Российской государственной библиотеки (РГБ) - http://elibrary.rsl.ru/.
8. Мировая цифровая библиотека - http://www.wdl.org/ru/.
9. Публичная Электронная Библиотека (области знания: гуманитарные и естественнонаучные) - http://lib.walla.ru/.
10. Электронная библиотека IQlib (образовательные издания, электронные учебники, справочные и учебные пособия) - http://www.iqlib.ru/.
11. Электронная библиотека Санкт-Петербургского государственного политехнического университета (методическая и учебная литература, создаваемая в электронном виде авторами СПбГТУ по профилю образовательной и научной деятельности университета) - http://www.unilib.neva.ru/rus/lib/resources/elib/.
12. Научная библиотека МГУ имени М.В. Ломоносова - http://nbmgu.ru/

5.5 Программное обеспечение, профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1. ГАРАНТ Платформа F1 [Электронный ресурс]: справочно-правовая система. / Разработчик ООО НПП «ГАРАНТ-Сервис», 119992, Москва, Воробьевы горы, МГУ, [1990–2019]. – Режим доступа в сети ОГУ для установки системы: \\fileserver1\GarantClient\garant.exe
2. Консультант Плюс [Электронный ресурс]: электронное периодическое издание справочная правовая система. / Разработчик ЗАО «Консультант Плюс», [1992–2019]. – Режим доступа к системе в сети ОГУ для установки системы: \\fileserver1\!CONSULT\cons.exe
3. Web of Science [Электронный ресурс]: реферативная база данных / компания Clarivate Analytics. – Режим доступа :http://apps.webofknowledge.com/, в локальной сети ОГУ.
4. American Chemical Society [Электронный ресурс] : база данных. – Режим доступа: https://www.acs.org/content/acs/en.html, в локальной сети ОГУ.
5. RoyalSocietyofChemistry[Электронный ресурс] : полнотекстовая база данных / Королевское химическое общество Великобритании. – Режим доступа :http://pubs.rsc.org/, в локальной сети ОГУ.
6. GAMESS (бесплатно распространяемый пакет программ)
7. DALTON (бесплатно распространяемый пакет программ)
8. Firefly 8.1 (бесплатно распространяемый пакет программ)
9. Операционная система MicrosoftWindows (В рамках лицензионного соглашения OVS-ES обеспечен весь компьютерный парк ОГУ).
10. Пакет настольных приложений Microsoft Office (Word, Excel, PowerPoint, OneNote, Outlook, Publisher, Access). (В рамках лицензионного соглашения OVS-ES обеспечен весь компьютерный парк ОГУ) для подготовки текстовых документов, обработки экспериментальных результатов и демонстрации презентаций.
11. Автоматизированная интерактивная система сетевого тестирования - АИССТ (зарегистрирована в РОСПАТЕНТ, Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2011610456, правообладатель – Оренбургский государственный университет), режим доступа - http://aist.osu.ru.

6 Материально-техническое обеспечение дисциплины

Аудитории оснащены комплектами ученической мебели, техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Для проведения лабораторных работ по курсу химии каждая лаборатория оборудована:

1) Вытяжным шкафом;
2) Рабочими столами;
3) Штативами для индивидуального набора реактивов и лабораторных принадлежностей;
4) Штативы с пробирками;
5) Набором оборудования общего пользования (эксикатор, кристаллизатор, промывалки, пинцет, тигельные щипцы, ерши для мытья посуды);
6) Наборами химической посуды;

7) Приборами (сушильный шкаф, муфельная печь, аналитические весы, РН-метр фотоэлектроколориметр)

8) Таблицами и плакатами.

9) Набором необходимых химических реактивов.

Лаборатории оснащены оборудованием (холодильники, дефлегматоры, кристаллизаторы, эксикаторы, штативы), приборами (нагревательные приборы, термометры, водяные и масляные бани, прибор Жукова, пикнометр, рефрактометр, прибор для фракционной разгонки при атмосферном давлении, прибор для вакуумной перегонки, прибор для перегонки с водяным паром), химической посудой (пробирки, химические стаканы, колбы, мерная посуда, воронки, фарфоровые чашки) и химическими реактивами, необходимыми для проведения лабораторных опытов. Имеются шаростержневые модели молекул и образцы различных полимерных соединений. В лабораториях предусмотрены аптечка, индивидуальные средства защиты, а также средства пожаротушения.

Помещение для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой, подключенной к сети "Интернет", и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ОГУ.