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 2025

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

Кафедра химии
наименование кафедры

протокол № 5 от "14" 01 2025 г.

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

Исполнители:
Доцент _____ 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 формирования фонда и научной обработки документов
_____ С.А. Бикшимирова
личная подпись *расшифровка подписи*

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

№ регистрации _____

© Пешков С.А., 2025
© ОГУ, 2025

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;* *- изучение разделов курса в системе электронного обучения;* *- 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	

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

Использование программ для построения и расчета химических молекул. 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.

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 abinitio. 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

№ ЛР	№ раздела	Наименование лабораторных работ	Кол-во часов
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
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

5 Учебно-методическое обеспечение дисциплины

1. Стромберг, А. Г.Физическая химия [Текст] : учеб. для хим. спец. вузов / А. Г. Стромберг, Д. П. Семченко.- 7-е изд., стер. - М. :Высш. шк., 2009. - 528 с. : ил. - Библиогр.: с. 511-515. - Предм. указ.: с. 516-522. - ISBN 978-5-06-006161-1.

2. Ермаков, А. И.Квантовая механика и квантовая химия [Текст] : учеб. пособие для вузов / А. И. Ермаков. - М. :Юрайт, 2010. - 556 с. : ил. - (Основы наук). - Библиогр.: с. 505-507. - Прил.: с. 517-528. - Предм. указ.: с. 540-555. - ISBN 978-5-9916-0587-8. - ISBN 978-5-9692-0331-0.

3. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия [Текст] : учебное пособие для студентов высших учебных заведений, обучающихся по специальности ВПО 020101.65 - "Химия" / А. И. Ермаков. - Москва :Юрайт, 2015. - 556 с. : ил. - (Основы наук). - Библиогр.: с. 508-516. - Прил.: с. 517-539. - Предм. указ.: с. 540-555. - ISBN 978-5-9916-0587-8.

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. 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. - 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). - Загл. с этикетки диска. - Систем. требования: IBM PC 686 (Pentium или выше) ; Microsoft Windows NT5.x (2000, XP, 7, 8, 10) ; 512 Мб ; монитор, поддерживающий режим 1024x768 ; мышь или аналогич. устройство - ISBN 978-5-7410-2586-4.. - ■ гос. регистрации 0322102479.

5.2 Дополнительная литература

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

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. Операционная система РЕД ОС

4. Пакет офисных приложений LibreOffice

5. Университетская платформа электронного обучения «Электронные курсы ОГУ в системе обучения Moodle» (http://moodle.osu.ru);

6. 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. 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 информационнообразовательную среду ОГУ.