

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

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой  
аналитической химии



Елисеева Т.В.  
подписи  
02.07.2021

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**  
**ФТД.В.01 Компьютерное моделирование химических структур**  
*Код и наименование дисциплины в соответствии с учебным планом*

1. Шифр и наименование направления подготовки/специальности:

04.06.01 Химия

2. Профиль подготовки/специализация: 02.00.02 Аналитическая химия, 02.00.06  
Высокомолекулярные соединения, 02.00.03 Органическая химия, 02.00.21 Химия  
твердого тела, 02.00.05 Электрохимия.

3. Квалификация (степень) выпускника: Исследователь. Преподаватель-  
исследователь.

4. Форма обучения: очная

5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: кафедра аналитической  
химии

6. Составители программы: проф., д.х.н., Бутырская Е.В.

7. Рекомендована: НМС химического факультета Протокол № 5 ОТ 17.06.2021 \_\_\_\_\_  
*отметки о продлении вносятся вручную*

8. Учебный год: 2022-2023

Семестр(ы): 4

## 9 Цели и задачи учебной дисциплины

**Целью** дисциплины является обучение аспирантов основам применения компьютерных программ GAUSSIAN и GaussView для решения научных задач методами квантовой химии.

**Задача** настоящего курса состоит в том, чтобы на основании полученных знаний, аспиранты могли правильно выбирать методы моделирования в соответствии с поставленной перед ними проблемой, разработать схему моделирования, практически провести его и интерпретировать полученные результаты.

**10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:** (блок Б1, базовая или вариативная часть, к которой относится дисциплина; требования к входным знаниям, умениям и навыкам; дисциплины, для которых данная дисциплина является предшествующей)

ФТД.1. Факультативная дисциплина.

**11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников):**

Компетенция		Планируемые результаты обучения
Код	Название	
ПК-3	владение системой фундаментальных химических понятий	<p>знать: основные тенденции развития в области квантовой химии и компьютерного моделирования;</p> <p>уметь: осуществлять отбор материала, характеризующего достижения квантовой химии с учетом специфики направления подготовки (органическая химия);</p> <p>владеть : методами и технологиями компьютерной химии, навыками публичной речи;</p>
ПК-6	владение навыками представления полученных результатов в виде кратких отчетов и презентаций	<p><b>Знать:</b> системное понимание области исследований;</p> <p><b>Уметь:</b> самостоятельно и/или под руководством под руководством специалистов более высокой – квалификации планировать, осуществлять научные исследования и апробировать и распространять их результаты;</p> <p><b>владеть:</b> методами оценки научных результатов и способов их практического использования.</p>
УК-1	Способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	<p>знать: современные научные достижения в области компьютерной химии; основы применения компьютерных программ GAUSSIAN и GaussView для решения научных задач; принципы моделирования структуры и свойств атомно-молекулярных систем методами квантовой химии; наиболее актуальные направления исследований в области компьютерной химии;</p> <p>уметь: выделять и систематизировать основные идеи в научных текстах; критически оценивать любую поступающую информацию, вне зависимости от источника;</p> <p>владеть: навыками сбора, обработки, анализа и систематизации информации по теме исследования; навыками выбора методов и средств решения задач</p>

		исследования.
УК-2	Способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	<p>знать: классические и современные методы решения задач по выбранной тематике научных исследований; уметь: выдвигать научную гипотезу, принимать участие в ее обсуждении; правильно ставить задачи по выбранной тематике, выбирать для исследования необходимые методы; применять выбранные методы к решению научных задач, оценивать значимость получаемых результатов; вести корректную дискуссию в процессе представления этих материалов;</p> <p>владеть: профессиональной терминологией компьютерной химии; навыками выступлений с изложением результатов научных исследований; навыками адекватного использования методов современной науки.</p>

**12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час.** (в соответствии с учебным планом) — 72 час/2 ЗЕТ.

**Форма промежуточной аттестации** (зачет/экзамен) зачет.

### 13. Виды учебной работы

Вид учебной работы		Трудоемкость		
		Всего	По семестрам	
			4 семестр	№ семестра
Аудиторные занятия				
в том числе:	лекции	12	12	
	практические	-	-	
	лабораторные	-	-	
Самостоятельная работа		60	60	
в том числе: курсовая работа (проект)		-	-	
Форма промежуточной аттестации (зачет с оценкой)				
Итого:		72	72	

#### 13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
<b>1. Лекции</b>		
2.1	Характеристики современных программных комплексов расчета структуры и свойств молекул. Тенденции развития компьютерной химии. Ведущие научные школы.	Ведущие научные школы России по квантовой химии: МГУ, ИОНХ РАН, НИФХИ им.Карпова, Институт катализа СО Академии наук, Казанский государственный технологический университет, СПбГУ, Ростовский государственный университет, ГЕОХИ РАН и их проблематика. Безэталонный структурно-групповой анализ молекулярных структур. Характеристика современных программных комплексов: Hyperchem, Moras, Gaussian, Gamess и др. Возможности программы Gaussian для расчета структуры и свойств атомно-молекулярных систем (АМС).

3. Лабораторные работы		
3.2	Методы квантовой химии в программе Gaussian. Основы практической работы с программами Gaussian и GausView с применением кластера высокопроизводительных вычислений ВГУ.	1 Расчетные методы точных значений термодинамических величин и энергий: Gaussian-1, Gaussian-2, Gaussian-3, CBS. 2. Применение программы Gaussian к исследованию процессов экстракции и сорбции. 3. Исследование свойств сложных молекулярных систем с помощью метода ONIOM. 4. Учет дисперсионных поправок при расчете энергий молекулярных систем.

### 13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Характеристики современных программных комплексов расчета структуры и свойств молекул. Тенденции развития компьютерной химии. Ведущие научные школы.	4			30	34
2	Методы квантовой химии в программе Gaussian. Основы практической работы с программами Gaussian и GausView с применением кластера высокопроизводительных вычислений ВГУ.	8			30	38
	Итого:	12		-	60	72

### 14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Работа с конспектами лекций, периодическими изданиями, использование интернет ресурсов, выполнение лабораторных работ.

### 15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины (список литературы оформляется в соответствии с требованиями ГОСТ и используется общая сквозная нумерация для всех видов источников)

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	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 : <a href="https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001015024.html">https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001015024.html</a>
2	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 : <a href="https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001015031.html">https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001015031.html</a> .
--	--

## б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
1	Бутырская Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView / Е.В. Бутырская. — М. : СОЛОН-ПРЕСС, 2011. — 218 с. <a href="https://avidreaders.ru/read-book/kompyuternaya-himiya-osnovy-teorii-i-rabota.html">https://avidreaders.ru/read-book/kompyuternaya-himiya-osnovy-teorii-i-rabota.html</a>
2	Российский Химический Журнал. Том XLVI (2002) № 5 Перспективы нанотехнологии <a href="http://www.chem.msu.ru/rus/jvho/2002-5/welcome.html">http://www.chem.msu.ru/rus/jvho/2002-5/welcome.html</a>
3	Российский Химический Журнал. Том LI (2007) № 5 Компьютерная химия <a href="http://www.chem.msu.ru/rus/jvho/2007-5/welcome.html">http://www.chem.msu.ru/rus/jvho/2007-5/welcome.html</a>
4	Попл Д.А. Квантово химические модели / Д.А. Попл // Успехи физ. наук. – 2002. – Т. 172, №3. – С. 349-356. <a href="http://www.mathnet.ru/links/109db7dae36387585ee811a58c82a598/ufn1995.pdf">http://www.mathnet.ru/links/109db7dae36387585ee811a58c82a598/ufn1995.pdf</a>
5	Кон В. Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности / В. Кон // Успехи физ. наук. – 2002. – Т. 172, № 3. – С. 336-349. <a href="http://www.mathnet.ru/links/aebff21405a755018e5c6ab0b3b1296e/ufn1994.pdf">http://www.mathnet.ru/links/aebff21405a755018e5c6ab0b3b1296e/ufn1994.pdf</a>
6	Периодические журналы: "Успехи химии", "Журнал структурной химии", "Журнал физической химии", "Журнал общей химии", "Nature", "Science".

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

№ п/п	Ресурс
1	ЭБС «Университетская библиотека online», <a href="http://biblioclub.ru/">http://biblioclub.ru/</a>
2	ЭБС «Консультант студента», <a href="http://www.studmedlib.ru">http://www.studmedlib.ru</a>
3	<a href="http://www.gaussian.com">http://www.gaussian.com</a>
4	<a href="http://www2.sccc.ru/PPP/Gaus-Dscr.htm">http://www2.sccc.ru/PPP/Gaus-Dscr.htm</a>
5	<a href="http://ru.wikipedia.org/wiki/Квантовая_химия">http://ru.wikipedia.org/wiki/Квантовая_химия</a>
6	<a href="http://www.qchem.ru/">http://www.qchem.ru/</a>
7	<a href="http://www.xumuk.ru/encyklopedia/1946.html">http://www.xumuk.ru/encyklopedia/1946.html</a>
8	Образовательный портал "Электронный университет ВГУ" <a href="https://edu.vsu.ru/">https://edu.vsu.ru/</a>

\* Вначале указываются ЭБС, с которыми имеются договора у ВГУ, затем открытые электронно-образовательные ресурсы

**16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы**  
(учебно-методические рекомендации, пособия, задачки, методические указания по выполнению практических (контрольных) работ и др.)

№ п/п	Источник
1	Специализированный компьютерный класс для выполнения студентами работ по дисциплине «Компьютерное моделирование химических структур», включающий 12 рабочих компьютеров на основе Pentium 4;
2	Программный продукт Gaussian03 Rev. C.02; программный продукт Gaussview 3.09
3	Практикум по компьютерной химии [Электронный ресурс] : методические указания для магистрантов 2-го года обучения химического факультета /

	сост.: Е. В. Бутырская, В. А. Шапошник .— Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2018 .— 43 с. — 2,7 п.л. — <URL:http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m18-220.pdf>.
4	Кластер высокопроизводительных вычислений ВГУ.

### 17. Информационные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы (при необходимости)

При реализации учебной дисциплины возможно использование элементов электронного обучения (ЭО) и дистанционных образовательных технологий (ДОТ) в части освоения лекционного материала, проведения текущей и промежуточной аттестации, проведения части лабораторных работ и самостоятельной работы обучающихся по дисциплине, позволяющие обеспечивать опосредованное взаимодействие (на расстоянии) преподавателей и обучающихся, включая инструменты электронной информационно-образовательной среды ВГУ «Электронный университет ВГУ» (<https://edu.vsu.ru>), проведение вебинаров, видеоконференций, взаимодействие в соцсетях, посредством электронной почты, мессенджеров. Для освоения дисциплины рекомендуется список литературы и ресурсы для электронного обучения (ЭО) (п. 15).

1. Компьютерная химия [Электронный ресурс] : 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 .— Электрон. текстовые дан. — Воронеж : Издательско-полиграфический центр Воронежского государственного университета, 2011 .— Загл. с титул. экрана .— Электрон. версия печ. публикации .— Свободный доступ из интрасети ВГУ .— Текстовый файл .— Windows 2000 ; Adobe Acrobat Reader.

2. Интерактивное взаимодействие с суперкомпьютером ВГУ.

### 18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

*(при использовании лабораторного оборудования указывать полный перечень, при большом количестве оборудования можно вынести данный раздел в приложение к рабочей программе)*

Специализированный компьютерный класс для выполнения студентами практических и лабораторных работ по дисциплине «Компьютерное моделирование химических структур», включающий 12 рабочих компьютеров на основе Pentium 4; программный продукт Gaussian03 Rev. C.02; программный продукт Gaussview 3.09; суперкомпьютер ВГУ.

Характеристики современных программных комплексов расчета структуры и свойств молекул. Тенденции развития компьютерной химии. Ведущие научные школы. Методы квантовой химии в программе Gaussian. Основы практической работы с программами Gaussian и GausView с применением кластера высокопроизводительных вычислений ВГУ.

### 19. Фонд оценочных средств:

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.

#### 19.1. Перечень компетенций с указанием этапов формирования и планируемых результатов обучения

Код и	Планируемые результаты обучения	Этапы формирования	
-------	---------------------------------	--------------------	--

содержание компетенции (или ее части)	(показатели достижения заданного уровня освоения компетенции посредством формирования знаний, умений, навыков)	компетенции (разделы (темы) дисциплины или модуля и их наименование)	ФОС* (средства оценивания)
ПК-3 ПК-6 УК-1 УК-2	<b>знать:</b> основные тенденции развития в области квантовой химии и компьютерного моделирования;	Характеристики современных программных комплексов расчета структуры и свойств молекул. Тенденции развития компьютерной химии. Ведущие научные школы.	Устный опрос на лекциях.
	<b>уметь:</b> осуществлять отбор материала, характеризующего достижения квантовой химии с учетом специфики направления подготовки (органическая химия);	Методы квантовой химии в программе Gaussian. Основы практической работы с программами Gaussian и GausView с применением кластера высокопроизводительных вычислений ВГУ.	Выполнение и сдача лаб. раб. №1-4
	<b>владеть :</b> методами и технологиями компьютерной химии, навыками публичной речи;	Методы квантовой химии в программе Gaussian. Основы практической работы с программами Gaussian и GausView с применением кластера высокопроизводительных вычислений ВГУ.	Устный опрос на лекциях. Выполнение и сдача лаб. раб. №1-4.

\* В графе «ФОС» в обязательном порядке перечисляются оценочные средства текущей и промежуточной аттестаций.

#### 19.2 Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (*результатов обучения*) при *промежуточной аттестации*

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
Полное освоение компетенций. Свободное оперирование программным учебным материалом с использованием сведений из других учебных предметов; умение осознанно и оперативно трансформировать полученные знания для решения проблем в нестандартных ситуациях; проявление целеустремленности, ответственности, познавательной активности, творческого отношения к учению, выполнение заданий творческого характера,	<i>Повышенный уровень</i>	<i>зачет</i>

высокий уровень самостоятельности и эрудиции.		
Достаточное освоение компетенций. Полное воспроизведение программного учебного материала с несущественными ошибками; применение знаний в знакомой ситуации по образцу. Настойчивость и стремление при овладении программным учебным материалом, оперирование им в знакомой ситуации; наличие единичных несущественных ошибок при описании и самостоятельных действиях; в процессе применения изученного знания; проявление стремления к творческому переносу знаний, организованности, самокритичности.	<i>Базовый уровень</i>	<i>зачет</i>
Удовлетворительное освоение компетенций. Неполное воспроизведение усвоенного программного учебного материала; наличие существенных, но устраняемых ошибок с помощью преподавателя; неумение применить изученное, стремление к преодолению трудностей, ситуативное проявление ответственности и самокритичности, наличие исправимых ошибок при дополнительных (наводящих) вопросах; затруднения в понимании отдельных понятий, трудности применение изученного преодолимые с помощью учителя, проявление волевых усилий, интереса к учению, самостоятельности, осмысленность действий и т.п.	<i>Пороговый уровень</i>	<i>зачет</i>
Неудовлетворительное освоение компетенций. Полное незнание материала или отказ без уважительной причины, знание о чем идет речь, различение правильного и неправильного знания, но неумение исправить ошибки при подсказке преподавателя.	–	<i>незачет</i>

### 19.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

#### 19.3.1 Перечень вопросов к зачету с оценкой:

- 1 Расчетные методы точных значений термодинамических величин и энергий: Gaussian-1, Gaussian-2, Gaussian-3, CBS.
- 2 Применение программы Gaussian к исследованию реакций комплексообразования.
- 3 Безэталонный структурно-групповой анализ молекулярных структур.
- 4 Применение программы Gaussian к исследованию процессов сорбции.
- 5 Примеры применения программы Gaussian для расчета ИК и ЯМР спектров.
- 6 Ведущие научные школы России по квантовой химии: МГУ, ИОНХ РАН и их проблематика.
- 7 Исследование свойств сложных молекулярных систем с помощью метода ONIOM.
- 8 Ведущие научные школы России по квантовой химии: НИФХИ им.Карпова, Институт катализа СО Академии наук и их проблематика.
- 9 Генерация cube-файлов в программе Gaussian для построения объемных изображений молекулярных орбиталей.

10 Ведущие научные школы России по квантовой химии: СПбГУ, Ростовский государственный университет, ГЕОХИ РАН и их проблематика.

11 Учет эффектов растворителя в программе Gaussian.

12 Компьютерные методы в аналитической химии.

### 19.3.2

**Перечень лабораторных работ.**

**Лабораторная работа № 1**

Расчетные методы точных значений термодинамических величин и энергий: Gaussian-1, Gaussian-2, Gaussian-3, CBS.

**Лабораторная работа № 2**

Применение программы Gaussian к исследованию процессов экстракции и сорбции.

**Лабораторная работа № 3.**

Исследование свойств сложных молекулярных систем с помощью метода ONIOM.

**Лабораторная работа № 4.**

Учет дисперсионных поправок при расчете энергий молекулярных систем.

### 19.3.4 Тестовые задания

### 19.3.4 Перечень заданий для контрольных работ

### 19.3.5 Темы курсовых работ

### 19.3.6 Темы рефератов

**19.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций**

- Время подготовки ответа при сдаче зачета оценкой в устной форме должно составлять не менее 40 минут (по желанию обучающегося ответ может быть досрочным). Время ответа – не более 15 минут.
- При подготовке к устному экзамену экзаменуемый, как правило, ведет записи в листе устного ответа, который затем (по окончании экзамена) сдается экзаменатору.
- При проведении устного экзамена экзаменационный билет выбирает сам экзаменуемый в случайном порядке.
- Экзаменатору предоставляется право задавать обучающимся дополнительные вопросы в рамках программы дисциплины текущего семестра, а также, помимо теоретических вопросов, давать задачи, которые изучались на практических занятиях.
- Оценка результатов устного аттестационного испытания объявляется обучающимся в день его проведения. При проведении письменных аттестационных испытаний или компьютерного тестирования – в день их проведения или не позднее следующего рабочего дня после их проведения.
- Результаты выполнения аттестационных испытаний, проводимых в письменной форме, форме итоговой контрольной работы или компьютерного тестирования, должны быть объявлены обучающимся и выставлены в зачётные книжки не позднее следующего рабочего дня после их проведения.