

МИНОБРНАУКИ 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: 02.00.03 **Органическая химия**

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

4. Форма обучения: **заочная**

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: **2024-2025**

Семестр(ы): 8

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>Знать: системное понимание области исследований;</p> <p>Уметь: самостоятельно и/или под руководством под руководством специалистов более высокой – квалификации планировать, осуществлять научные исследования и апробировать и распространять их результаты;</p> <p>владеть: 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	
			8 семестр	№ семестра
Аудиторные занятия				
в том числе:	лекции	12	12	
	практические	-	-	
	лабораторные	-	-	
Самостоятельная работа		56	56	
в том числе: курсовая работа (проект)		-	-	
Контроль		4	4	
Форма промежуточной аттестации (зачет)				
Итого:		72	72	

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
1. Лекции		
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, Морас, 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)				Всего
		Лекции	Практические	Контроль	Самостоятельная работа	
1	Характеристики современных программных комплексов расчета структуры и свойств молекул. Тенденции развития компьютерной химии. Ведущие научные школы.	4		2	26	32
2	Методы квантовой химии в программе Gaussian. Основы практической работы с программами Gaussian и GausView с применением кластера высокопроизводительных вычислений ВГУ.	8		2	30	40
Итого:		12		4	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 : https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001015024.html
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 : https://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001015031.html .
--	--

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. https://avidreaders.ru/read-book/kompyuternaya-himiya-osnovy-teorii-i-rabota.html
2	Российский Химический Журнал. Том XLVI (2002) № 5 Перспективы нанотехнологии http://www.chem.msu.ru/rus/jvho/2002-5/welcome.html
3	Российский Химический Журнал. Том LI (2007) № 5 Компьютерная химия http://www.chem.msu.ru/rus/jvho/2007-5/welcome.html
4	Попл Д.А. Квантово химические модели / Д.А. Попл // Успехи физ. наук. - 2002. - Т. 172, №3. - С. 349-356. http://www.mathnet.ru/links/109db7dae36387585ee811a58c82a598/ufn1995.pdf
5	Кон В. Электронная структура вещества - волновые функции и функционалы плотности / В. Кон // Успехи физ. наук. - 2002. - Т. 172, № 3. - С. 336-349. http://www.mathnet.ru/links/aebff21405a755018e5c6ab0b3b1296e/ufn1994.pdf
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», http://biblioclub.ru/
2	ЭБС «Консультант студента», http://www.studmedlib.ru
3	http://www.gaussian.com
4	http://www2.sccc.ru/PPP/Gaus-Dscr.htm
5	http://ru.wikipedia.org/wiki/Квантовая_химия
6	http://www.qchem.ru/
7	http://www.xumuk.ru/encyklopedia/1946.html
8	Образовательный портал "Электронный университет ВГУ" https://edu.vsu.ru/

* 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	знать: 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.
	уметь: 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
	владеть : 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 устранимых 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:

- 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.

19.4. 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.