

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет



УТВЕРЖДАЮ:

И.о. декана химического факультета  
факультета А.С. Князев

«08» апреля 20 22 г.

Рабочая программа дисциплины

**Вычислительные методы в химии**

по направлению подготовки

**04.03.01 Химия**

Направленность (профиль) подготовки:

**«Химия»**

Форма обучения

**Очная**

Квалификация

**Бакалавр**

Год приема

**2021**

Код дисциплины в учебном плане: Б1.О.13

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

В.В. Шелковников

Председатель УМК

В.В. Хасанов

## **1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины**

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ОПК-3. Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники.

– ОПК-5. Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК 3.1. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности.

ИОПК 3.2. Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности.

ИОПК 5.1. Использует современные IT-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля.

ИОПК 5.2. Соблюдает нормы информационной безопасности в профессиональной деятельности.

## **2. Задачи освоения дисциплины**

– Освоить и научиться применять понятийный аппарат дисциплины «Вычислительные методы в химии»;

– Освоить и научиться применять знания в области теории строения атомов и молекул для их использования при проведении квантово-химических расчетов с целью решения практических химических задач.

## **3. Место дисциплины в структуре образовательной программы**

Дисциплина относится к обязательной части образовательной программы.

## **4. Семестр освоения и форма промежуточной аттестации по дисциплине**

Семестр 7, зачет.

## **5. Входные требования для освоения дисциплины**

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: Квантовая химия, Физическая химия, Органическая химия, Строение вещества.

## **6. Язык реализации**

Русский

## **7. Объем дисциплины (модуля)**

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

– лекции: 34 ч.;

– практические занятия: 34 ч.;

в том числе практическая подготовка: 34 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

## **8. Содержание дисциплины, структурированное по темам**

Тема 1. Многоэлектронный атом

1.1 Введение. Основные понятия квантовой механики. Квантово-механическое описание многоэлектронного атома.

1.2 Знакомство с программой Chem Draw. Рисование и редактирование структурных химических формул в программе ChemDraw. Предсказание спектров ЯМР с использованием программы ChemDraw.

Тема 2. Квантовая химия молекулы

2.1 Метод Хартри-Фока. Электронная корреляция. Базисные наборы атомных орбиталей. Теория функционала плотности. Полуэмпирические методы. Расчет свойств молекул, полные энергии.

2.2 Знакомство с программами Gaussian и Gaussian View. Оптимизация геометрических параметров, расчет электронной энергии. Расчет и интерпретация колебательных спектров. Расчет термодинамических параметров веществ и реакций.

Тема 3. Квантово-химическое описание химических реакций

3.1 Поверхность потенциальной энергии реакции. Квантово-химическое описание реакций в жидкой и твердой фазе.

3.2 Исследование химических реакций радикального распада. Исследование нерадикальных реакций методами TS и QST2 построение ППЭ, расчет энтальпии, энтропии, энергии Гиббса и энергии активации реакции.

## 9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости и отчетов по выполненным лабораторным работам и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

## 10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет состоит из двух частей:

1. Зачет по лекционной части курса в режиме тестирования в системе Moodle (Итоговый тест);
2. Зачет по практической части курса.

Зачет по лекционной части курса проводится в тестовой форме. Итоговый тест состоит из 25 вопросов по всему курсу "Вычислительных методов в химии". Каждый вопрос оценивается в 1 балл, для получения зачета необходимо набрать 18 и более баллов. На выполнение теста отводится 30 минут.

Примеры заданий для зачета по лекционной части курса:

1. Переходное состояние соответствует на ППЭ точке, которая называется
  - a) Глобальный минимум
  - b) Локальный минимум
  - c) Локальный максимум
  - d) Седловая точка
2. Полуэмпирический метод, используемый для расчета спектра молекул
  - a) ZINDO/S
  - b) AM1
  - c) PM3
  - d) PM6
3. Выбери верное утверждение о теории функционала плотности
  - a) Улучшенная теория Хартри-Фока
  - b) Метод учета электронной корреляции
  - c) Ключевой физической величиной является электронная плотность  $\rho$
  - d) Не использует корреляционно-обменный функционал

4. Соотнесите базисный набор и рассчитываемое свойство

1	Внутри- и межмолекулярные взаимодействия	A	HF/6-31++G**
2	Молекулярная геометрия	B	HF/6-31++G**
3	Химическая связь. Энергии реакций	C	MP2/6-311+G**
4	Взаимодействие ионов и диполей. Водородные связи	D	HF/6-31G

5. Выберите адекватную схему расчета энергии системы с учетом электронной корреляции

- CCSD(T)/cc-pVQZ//MP2/6-31G(d)
- MP2/6-31G(d)//MP4/6-31G(d)
- HF/6-311G(d)//HF/6-31G
- CIS/6-31G(d)//CIS/cc-pVQZ

6. В основе метода Хартри-Фока для атомов лежит

- Вариационный принцип и приближение независимых частиц, процедура ССП
- Метод МО ЛКАО, одноэлектронное приближение
- Приближение независимых частиц, детерминант Слетера, процедура ССП
- Теорема Купманса, детерминант Слетера, процедура ССП

Зачет по практической части курса состоит в выполнении одного комплексного задания по всему курсу "Вычислительных методов в химии". Продолжительность зачета 1,5 часа.

Примеры заданий для зачета по практическим занятиям:

1. Рассчитайте с использованием программы Gaussian тепловой эффект реакций дегидрирования циклогексадиена-1,3 и дегидрирования этана. Используйте для этого метод HF/3-21G. Как вы можете объяснить полученные результаты?
2. Рассчитайте относительную устойчивость двух изомеров в газовой фазе: пропенол-2 и пропанон. В какую сторону будет смещено равновесие в кето-енольной таутомерии. Проведите расчет с учетом нулевых колебаний и без их учета. Сравните полученные результаты.
3. В программе Gaussian методом QST2 с использованием базисного набора 3-21 (HF) оптимизируйте переходное состояние реакции  $\text{CH}_3\text{-OH} + \text{Br}^- \rightarrow \text{CH}_3\text{-Br} + \text{OH}^-$ . Докажите, что это состояние является переходным, укажите значение энтальпии с учетом энергии нулевых колебаний. Данная реакция протекает в водном растворе.
4. Рассчитайте колебательный спектр молекулы пропена. Сравните с экспериментальным спектром и сделайте вывод о целесообразности использования выбранной вами схемы расчета.

Результаты зачета определяются успешным выполнением заданий по обеим частям зачета, а также контролем посещаемости, оценками «зачтено» и «не зачтено».

## 11. Учебно-методическое обеспечение

- а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=21480>
- б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.
- в) План практических занятий по дисциплине.
- г) Методические указания по проведению практических занятий.

## 12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

- а) основная литература:
  - Фатеев А. В. Вычислительные методы в химии : лабораторные работы : учебно-методическое пособие по курсу "Вычислительные методы в химии" для студентов химического факультета ТГУ / А. В. Фатеев, В. П. Тугульдурова. – Томск : Издательство Томского государственного университета, 2021. – 103 с.  
<http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Repository/koha:000566952>
  - Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учеб. пособие для вузов 3-е изд. / В. Г. Цирельсон. – М. : Издательство «БИНОМ. Лаборатория знаний», 2014. – 495 с.  
<https://e-lanbook-com.ez.lib.tsu.ru/book/172254>
  - Ермаков А. И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 ч. : учебник и практикум для вузов / А. И. Ермаков. – М. : Издательство Юрайт, 2020. – 585 с.  
<https://urait-ru.ez.lib.tsu.ru/book/kvantovaya-mehanika-i-kvantovaya-himiya-v-2-ch-chast-1-kvantovaya-mehanika-491725>  
<https://urait-ru.ez.lib.tsu.ru/book/kvantovaya-mehanika-i-kvantovaya-himiya-v-2-ch-chast-2-kvantovaya-himiya-491726>
  - Бутырская Е. В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView / Е. В. Бутырская. – М. : ООО «СОЛОН-ПРЕСС», 2011. – 218 с.  
<https://www.litres.ru/e-v-butyrskaya/komputernaya-himiya-osnovy-teorii-i-rabota-s-programmami-gaussian-i-gaussview/>
  - Соловьев М. Е. Компьютерная химия / – М. Е. Соловьев, М. М. Соловьев. – М. : ООО «СОЛОН-ПРЕСС», 2005. – 536 с.
  - Ochterski J. W. Thermochemistry in Gaussian / J. W. Ochterski. – Gaussian, Inc., 2000. – 19 p. <https://gaussian.com/thermo/>

### б) дополнительная литература:

- Полещук О. Х. Химические исследования методами расчета электронной структуры молекул : учебное пособие / О. Х. Полещук, Д. М. Кижнер. – Томск : Издательство ТПУ, 2006. – 146 с.
- Цышевский Р. В. Квантово-химические расчеты механизмов химических реакций : учебно-методическое пособие / Р. В. Цышевский, Г. Г. Гарифзянова, Г. М. Храпковский. – Казань : Издательство КНИТУ, 2012. – 87 с.

### в) ресурсы сети Интернет:

- Официальный сайт Gaussian, Inc. <https://gaussian.com/>

## 13. Перечень информационных технологий

- а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:
  - Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. and et al. Gaussian 09, Revision C.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010.
  - ACD/ChemSketch;

- Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);
- публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

- Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>
- Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
- ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>
- ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>
- Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
- ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>
- ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

в) профессиональные базы данных:

- <https://webbook.nist.gov/chemistry/> – стандартная справочная база данных NIST;
- [https://sdfs.db.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/cre\\_index.cgi](https://sdfs.db.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/cre_index.cgi) – спектральная база данных органических соединений;
- <https://cccbdb.nist.gov/geom1x.asp> – база данных по рассчитанной квантово-химическими методами геометрии соединений;
- <http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tky.pl?show=welcome.html/welcome.html> – база данных термических констант соединений.

#### **14. Материально-техническое обеспечение**

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

#### **15. Информация о разработчиках**

Тугульдурова Вера Петровна, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, старший преподаватель.