

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

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО:

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

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
2023

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
В.В. Шелковников

Председатель УМК
Л.Н. Мишенина

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 Блоку 1 «Дисциплины (модули)».

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 ρ
 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

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

6. В основе метода Хартри-Фока для атомов лежит

- a) Вариационный принцип и приближение независимых частиц, процедура ССП
 b) Метод МО ЛКАО, одноэлектронное приближение
 c) Приближение независимых частиц, детерминант Слетера, процедура ССП
 d) 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://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/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/tkv.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, канд. хим. наук, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент