

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

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО:
И.о. декана
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
2024

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
В.В. Шелковников

Председатель УМК
В.В. Шелковников

Томск – 2024

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(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Седьмой семестр, зачет с оценкой

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

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

-лекции: 34 ч.

-практические занятия: 40 ч.

в том числе практическая подготовка: 40 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.

Оценочные материалы текущего контроля размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» - <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет с оценкой в седьмом семестре проводится в письменной форме по билетам. Экзаменационный билет состоит из двух частей. Продолжительность зачета с оценкой 1 час.

Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» - <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в среде электронного обучения «iDO» - <https://lms.tsu.ru/enrol/index.php?id=28526>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

в) План практических занятий по дисциплине.

г) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

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