

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

Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ:

И.о. декана химического факультета

А. С. Князев

Рабочая программа дисциплины

**Вычислительные методы в химии**

по направлению подготовки / специальности

**04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия**

Направленность (профиль) подготовки / специализация:

**Фундаментальная и прикладная химия**

Форма обучения

**Очная**

Квалификация

**химик-специалист, преподаватель**

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-2. Способен проводить синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследовать процессы с их участием;

ОПК-3. Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

РООПК 2.2 Знает теоретические основы методов изучения состава, структуры и свойств для грамотного выбора метода исследования

РООПК 3.1 Знает основы теоретической физики, математического анализа и квантовой химии; основные теоретические и полуэмпирические модели, применяемые при решении задач химической направленности

РООПК 3.2 Умеет решать расчетно-теоретические задачи химической направленности по разработанным методикам, использовать аппарат теоретической химии и физики для грамотной интерпретации полученных результатов

## **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 «Дисциплина (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, Неорганическая 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, устными опросами на практических занятиях 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

Для допуска к зачёту необходимо получить оценку «Зачтено» по итогам текущего контроля знаний.

**Зачет с оценкой** состоит из двух частей:

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

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 (РООПК 3.1, РООПК 3.2):

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.

Критерии оценивания:

Оценка «Зачтено» ставится при выполнении следующих условий:

– комплексное задание выполнено в полном объеме; структура отчёта по заданию соответствует вышеописанным пунктам, в отчете правильно и аккуратно оформлены все необходимые записи, таблицы, рисунки, графики, вычисления, сделанные выводы соответствуют задачам работы и содержат итоговые качественные и количественные результаты исследований;

– комплексное задание выполнено в полном объеме; структура отчёта соответствует вышеописанным пунктам, в отчете оформлены все таблицы, рисунки, графики, вычисления, но допущено два-три недочета, или не более двух негрубых ошибок (не влияющих на качество выводов), сделанные выводы соответствуют задачам работы и содержат итоговые качественные и количественные результаты исследований;

Оценка «Не зачтено» ставится при выполнении следующих условий:

– обучающийся не выполнил комплексное задание;

– качество проведенных измерений не позволяет сделать верных и обоснованных выводов (допущены принципиальные ошибки в вычислениях, в выполнении работы);

– комплексное задание выполнено не полностью, так что объем выполненных наблюдений не достаточен для достижения поставленной цели и не позволяет сделать верных и обоснованных выводов.

Зачет по лекционной части курса проводится в тестовой форме. Итоговый тест состоит из 40 вопросов по всему курсу «Вычислительных методов в химии». Каждый вопрос оценивается в 1 балл. На выполнение теста отводится 60 минут.

Примеры заданий для зачета по лекционной части курса (РООПК 2.2, РООПК 3.1):

1. Переходное состояние соответствует на ППЭ точке, которая называется

- Глобальный минимум
- Локальный минимум
- Локальный максимум
- Седловая точка

2. Полуэмпирический метод, используемый для расчета спектра молекул

- ZINDO/S
- AM1
- PM3
- PM6

3. Выберите верное утверждение о теории функционала плотности

- Улучшенная теория Хартри-Фока
- Метод учета электронной корреляции
- Ключевой физической величиной является электронная плотность  $\rho$
- 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)

- 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

Критерии оценивания:

Результаты зачета определяются успешным выполнением заданий по обеим частям зачета и на основании Итогового теста определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Оценка «отлично» выставляется, если обучающий выполнил тест и получил 30 и более баллов;

Оценка «хорошо» выставляется, если обучающий выполнил тест и получил не менее 25, но не более 30 баллов;

Оценка «удовлетворительно» выставляется, если обучающий выполнил тест и получил не менее 20, но не более 25 баллов;

Оценка «неудовлетворительно» выставляется, если не выполнил тест и/или получил менее 20 баллов.

## 11. Учебно-методическое обеспечение

- a) 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 лабораторных работ.
- д) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

## 12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

- a) 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](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=welcom.html/welcom.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.