

УТВЕРЖДАЮ

Первый проректор, проректор по  
УР

\_\_\_\_\_ А.Е. Рудин

«04» \_\_\_\_ 04 \_\_\_\_ 2023 года

## Рабочая программа дисциплины

**Б1.О.17**

Вычислительные методы в химии

Учебный план: 2024-2025 04.05.01 ИПХЭ Медицинская химия ОО №3-1-155.plx

Кафедра: **44** Теоретической и прикладной химии

Направление подготовки:  
(специальность) 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Профиль подготовки: специализация "Медицинская химия"  
(специализация)

Уровень образования: специалитет

Форма обучения: очная

### План учебного процесса

Семестр (курс для ЗАО)		Контактная работа обучающихся		Сам. работа	Контроль, час.	Трудоёмкость, ЗЕТ	Форма промежуточной аттестации
		Лекции	Практ. занятия				
4	УП	17	34	20,75	0,25	2	Зачет
	РПД	17	34	20,75	0,25	2	
Итого	УП	17	34	20,75	0,25	2	
	РПД	17	34	20,75	0,25	2	

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, утвержденным приказом Минобрнауки России от 13.07.2017 г. № 652

Составитель (и):

доктор химических наук, Заведующий кафедрой

\_\_\_\_\_

Новоселов Николай  
Петрович

От кафедры составителя:

Заведующий кафедрой теоретической и прикладной химии

\_\_\_\_\_

Новоселов Николай  
Петрович

От выпускающей кафедры:

Заведующий кафедрой

\_\_\_\_\_

Новоселов Николай  
Петрович

Методический отдел:

\_\_\_\_\_

## 1 ВВЕДЕНИЕ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

**1.1 Цель дисциплины:** сформировать компетенции обучающихся в области современных вычислительных методов для изучения свойств и строения химических соединений, познакомить с современным программным обеспечением в области вычислительной химии

### 1.2 Задачи дисциплины:

- рассмотреть современные представления о методах расчета атомных и молекулярных систем;
- рассмотреть статистические методы обработки данных, полученных в ходе эксперимента;
- показать особенности постановки и проведения вычислительного эксперимента и интерпретации его результатов.

### 1.3 Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Предварительная подготовка предполагает создание основы для формирования компетенций, указанных в п. 2, при изучении дисциплин:

Общая и неорганическая химия

Математика

Информационные технологии

## 2 КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

<b>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</b>
<b>Знать:</b> теоретические основы квантово-химических расчетов молекулярных систем и механизмов химических реакций.
<b>Уметь:</b> использовать специализированное программное обеспечение для проведения квантово-химических расчетов механизмов химических реакций и расчетов структуры и свойств молекулярных систем.
<b>Владеть:</b> навыками проведения квантово-химических расчетов механизмов химических реакций и расчетов структуры и свойств молекулярных систем.
<b>ОПК-4: Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач</b>
<b>Знать:</b> статистические методы обработки данных, полученных в ходе химического эксперимента.
<b>Уметь:</b> определять случайные и систематические ошибки при проведении химического эксперимента, представлять результаты анализа в виде одномерных распределений и рассчитывать статистические показатели.
<b>Владеть:</b> навыками определения принципиальных границ физических, химических и физико-химических методов анализа.

### 3 РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Наименование и содержание разделов, тем и учебных занятий	Семестр (курс для ЗАО)	Контактная работа		СР (часы)	Инновац. формы занятий	Форма текущего контроля
		Лек. (часы)	Пр. (часы)			
Раздел 1. Теоретические основы вычислительной химии	4					РГР
Тема 1. Предмет вычислительной химии. Компьютерный эксперимент и компьютерное моделирование. Методы вычислительной химии. Области применения. Практическое занятие: «Основы работы в молекулярных редакторах. Расчёт геометрических параметров молекул»		3	4	4		
Тема 2. Основные понятия квантовой химии. Уравнения квантовой химии. Решение уравнения Шрёдингера для атома водорода. Геометрические параметры молекул, определяющие их свойства. Симметрия. Статистические методы в химии. Обработка результатов эксперимента. Практическое занятие: «Основы работы в программах вычислительной химии»		4	6	4	ГД	
Раздел 2. Методы расчёта структуры и свойств химической системы. Обработка результатов эксперимента						
Тема 3. Методы молекулярной механики. Силовые поля. Преимущества и ограничения. Практическое занятие: «Расчет энергий и порядков связей молекулярных структур»		2	6	3		
Тема 4. Метод валентных связей. Метод молекулярных орбиталей. Полная волновая функция молекулы. Приближение линейных комбинаций атомных орбиталей. Практическое занятие: «Расчёт молекулярных орбиталей. Интерпретация результатов расчёта»		2	6	3		
Тема 5. Полуэмперические методы. Основные приближения полуэмперических методов. Методы CNDO и INDO. Методы MINDO. Метод MNDO. Модель Остина. Параметрические модели PM. Сравнительная характеристика. Практическое занятие: «Расчет ИК- и ЯМР- спектров молекул органических соединений»		2	6	2,75		
Тема 6. Неэмперические (ab initio) методы. Методы функционала плотности. Практическое занятие: «Реакционная способность молекул. Пути реакции.»		4	6	4	ГД	
Итого в семестре (на курсе для ЗАО)		17	34	20,75		
Консультации и промежуточная аттестация (Зачет)		0,25				
<b>Всего контактная работа и СР по дисциплине</b>		51,25	20,75			

#### 4 КУРСОВОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ

Курсовое проектирование учебным планом не предусмотрено

#### 5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

##### 5.1 Описание показателей, критериев и системы оценивания результатов обучения

###### 5.1.1 Показатели оценивания

Код компетенции	Показатели оценивания результатов обучения	Наименование оценочного средства
ОПК-3	Описывает процесс квантово-механических расчетов молекулярных систем, механизмы химических реакций. С помощью специализированного программного обеспечения проводит квантово-химические расчеты. Определяет структуру и свойства молекулярных систем, предсказывает механизм реакции.	Вопросы для устного собеседования.  Практико-ориентированные
ОПК-4	Описывает свойства информации и основные методы ее поиска и обработки, принципы использования вычислительных методов в химии, Идентифицирует тенденции и основные положения в области вычислительных методов. Осуществляет поиск и обмен информацией, данными и файлами с использованием сетевых, телекоммуникационных технологий. Использует основные сервисы Internet. Самостоятельно работает с инструментами электронного офиса, веб-браузером и сетевыми облачными службами.	Вопросы для устного собеседования.  Практико-ориентированные задания.

###### 5.1.2 Система и критерии оценивания

Шкала оценивания	Критерии оценивания сформированности компетенций	
	Устное собеседование	Письменная работа
Зачтено	Обучающийся показывает всестороннее, систематическое и глубокое знание основного и дополнительного учебного материала, правильно решает практическое задание; демонстрирует критический, оригинальный подход к материалу.	
Не зачтено	Обучающийся показывает незнание основного учебного материала, допускает принципиальные ошибки при ответе	

##### 5.2 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

###### 5.2.1 Перечень контрольных вопросов

№ п/п	Формулировки вопросов
Семестр 4	
1	Компьютерная модель. Основные принципы построения компьютерных моделей.
2	Компьютерный эксперимент. Основные принципы проведения компьютерного эксперимента.
3	Статистические методы в химии. Обработка результатов эксперимента.
4	Вычислительная химия. Предмет вычислительной химии.
5	Квантовая химия. Основные положения квантовой химии.
6	Теория валентных связей. Основные положения.
7	Теория молекулярных орбиталей. Основные положения.
8	Методы вычислительной химии. Сравнительная характеристика основных методов.
9	Методы молекулярной механики. Достоинства и недостатки. Применение
10	Полуэмперические методы расчёта. Основные приближения. Сравнение методов.
11	Неэмперические методы. Достоинства и недостатки.
12	Методы функционала плотности. Основные потенциалы. Гибридные потенциалы.
13	Оценка реакционной способности. Кинетика химической реакции.

###### 5.2.2 Типовые тестовые задания

Не предусмотрены

### 5.2.3 Типовые практико-ориентированные задания (задачи, кейсы)

1. Используя Q-критерий, установить, имеются ли грубые погрешности (промахи) в результатах иодометрического определения массовой доли (%)  $\text{Cu}^{2+}$ -ионов: 18,05; 18,00; 18,20; 18,25 ( $P=0,95$ );

2. Среднее арифметическое значение трех измерений объема по шкале бюретки с ценой деления 0,1 см<sup>3</sup> равно 12,12345 см<sup>3</sup>. Сколько значащих цифр следует оставить в полученном результате?;

3. Среднее арифметическое значение трех измерений массы шавелевой кислоты в растворе равно 0,3248 г, стандартное отклонение  $s = 0,0015$  г. Установить границы доверительного интервала для среднего значения массы  $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$  в растворе ( $P = 0,95$ );

4. Дисперсии результатов определения массовой доли (%) хлороводорода в растворе методами алкалометрии и иодометрии составляют соответственно 0,002732 и 0,03441. Рассчитать F-критерий и сделать вывод о значимости расхождения дисперсий. Число параллельных определений первым методом  $n_1 = 3$ , вторым методом  $n_2 = 4$  ( $P = 0,95$ ).

5. Параллельные определения массовой доли (%) бензойной кислоты в растворе дали следующие результаты: 0,65; 0,63; 0,60; 0,61; 0,68. Проверить полученные данные на наличие грубых погрешностей по Q-критерию;

6. В трех навесках легированной стали определяли массовую долю (%) ванадия спектрофотометрическим методом с дихлорхромотроповой кислотой. При этом были получены следующие результаты: 0,54; 0,48; 0,45. Рассчитать стандартное отклонение для единичного определения  $s$  и границы доверительного интервала для среднего значения массовой доли (%) ванадия при доверительной вероятности  $P = 0,95$ .

7. При определении относительной атомной массы углерода были получены следующие результаты: 12,0080; 12,0095; 12,0097; 12,0101; 12,0102; 12,0106; 12,0111; 12,0113; 12,0118; 12,0120. Рассчитать границы доверительного интервала для среднего значения относительной атомной массы углерода при доверительной вероятности  $P = 0,95$  и относительное стандартное отклонение (%);

8. Используя программу Excel, построить функцию, аппроксимирующую значения:

$$x_i = 1; 1,5; 2; 2,5; 3; 3,5; 4$$

$$y_i = 0,3; 0,7; 1,4; 1,9; 1,3; 0,5; 0,3$$

9. В специализированной программе постройте молекулу 1,2-дихлорэтана. Определить длину связи C-C; валентный угол C<sub>1</sub>-C-C и двугранный угол C<sub>1</sub>-C-C-C<sub>1</sub>.

10. Постройте молекулу 2,2-динитроэтилендиамина (DADNE). В программе Gaussian проведите расчет оптимизации геометрических параметров и частот колебаний. По итогам расчета выпишите из выходного файла значения энтальпии, свободной энергии Гиббса и энтропии.

11. Рассчитайте изменение потенциальной энергии методом мягкого сканирования в молекуле  $\text{Li}_2\text{O}$  в зависимости от длины связи Li-O. Начальное значение длины связи 1 Å, величина шага 0,1 Å и количество шагов - 20.

### 5.3 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, владений (навыков и (или) практического опыта деятельности)

#### 5.3.1 Условия допуска обучающегося к промежуточной аттестации и порядок ликвидации академической задолженности

Проведение промежуточной аттестации регламентировано локальным нормативным актом СПбГУПТД «Положение о проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся»

#### 5.3.2 Форма проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Устная

Письменная

Компьютерное тестирование

Иная

#### 5.3.3 Особенности проведения промежуточной аттестации по дисциплине

К зачету допускаются студенты, выполнившие все расчетно-графические работы.

Время на подготовку ответа на вопрос - 20 минут.

## 6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### 6.1 Учебная литература

Автор	Заглавие	Издательство	Год издания	Ссылка
<b>6.1.1 Основная учебная литература</b>				
Ширяев, А. К.	Квантовая механика и квантовая химия	Самара: Самарский государственный технический университет, ЭБС АСВ	2017	<a href="http://www.iprbookshop.ru/90518.html">http://www.iprbookshop.ru/90518.html</a>
Харлампики, Д. Д., Адамсон, С. О.	Вычислительные методы в химии	Москва: Московский педагогический государственный университет	2020	<a href="https://www.iprbookshop.ru/105894.html">https://www.iprbookshop.ru/105894.html</a>
<b>6.1.2 Дополнительная учебная литература</b>				
Максимова, Н. Н.	Моделирование в химии	Благовещенск: Амурский государственный университет	2020	<a href="http://www.iprbookshop.ru/103891.html">http://www.iprbookshop.ru/103891.html</a>

## 6.2 Перечень профессиональных баз данных и информационно-справочных систем

1. Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам» [Электронный ресурс]. URL:<http://window.edu.ru/>.
2. Электронно-библиотечная система IPRbooks: <http://www.iprbookshop.ru>
3. Электронная библиотека учебных изданий СПбГУПТД: <http://publish.sutd.ru>
4. Единый портал интернет тестирования в сфере образования [Электронный ресурс]. URL:<http://www.i-exam.ru/>.
5. Материалы Информационно-образовательной среды заочной формы обучения СПбГУПТД [Электронный ресурс]. URL:[http://sutd.ru/studentam/extramural\\_student/](http://sutd.ru/studentam/extramural_student/).

## 6.3 Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения

MicrosoftOfficeProfessional  
Microsoft Windows

## 6.4 Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Аудитория	Оснащение
Компьютерный класс	Мультимедийное оборудование, компьютерная техника с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду
Лекционная аудитория	Мультимедийное оборудование, специализированная мебель, доска
Учебная аудитория	Специализированная мебель, доска