



Основная профессиональная образовательная программа  
04.04.01 Химия  
(Инноватика в химии и химическом образовании)

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

**ИВАНОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

Кафедра фундаментальной и прикладной химии

ОДОБРЕНО:

Руководитель ОП

Т.П. Кустова

(подпись)

« 01 » 09 20 21 г.

**Рабочая программа дисциплины**

Компьютерное моделирование и структурная химия

Уровень высшего образования:	магистратура
Квалификация выпускника:	магистр
Направление подготовки:	04.04.01 Химия
Направленность (профиль) образовательной программы:	Инноватика в химии и химическом образовании



## 1. Цели освоения дисциплины

**Целями дисциплины являются:**

- расширение представлений о современной теоретической химии, современных методах квантово-химических расчетов, а также о понятиях: структура молекул, типы структурной нежесткости, внутримолекулярные перегруппировки;
- расширение представлений теоретической химии в рамках качественных орбитальных теорий, разработанных для определенных классов химических соединений,
- приобретение знаний, умений и навыков для самостоятельного исследования свойств молекулярных систем (с том числе конформационных свойств молекулярных систем, имеющих нежесткие координаты) и решения теоретических задач химии, а также для применения приобретенных навыков в научно-исследовательской, научно-производственной и педагогической деятельности.

## 2. Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина «Компьютерное моделирование и структурная химия» относится к обязательной части образовательной программы (обязательная дисциплина).

Дисциплина «Компьютерное моделирование и структурная химия» базируется на знаниях, умениях и навыках, приобретенных студентами в ходе изучения базовых дисциплин программ ВО химического профиля: «Квантовая механика и квантовая химия», «Математика», «Физика», «Строение вещества», «Компьютерная химия», «Неорганическая химия», «Органическая химия», а также в ходе изучения дисциплин «Компьютерные технологии в науке и образовании» и «Гетероциклические и полиароматические органические соединения».

Знания, полученные при изучении дисциплины «Компьютерное моделирование и структурная химия», могут быть использованы студентами при изучении таких предметов, как «Супрамолекулярная химия», «Приоритетные направления развития химии в XXI веке», «Жидкокристаллические материалы», а также при прохождении производственной практики, научно-исследовательской работы, производственной практики, преддипломной практики.

Для освоения данной дисциплины обучающийся должен:

**Знать:**

- основы квантовой механики и квантовой химии, приближения, используемые при решении уравнения Шредингера для молекул

**Уметь:**

- выполнять расчеты геометрического строения, частот колебаний и электронных характеристик молекул полуэмпирическими методами с помощью программы HyperChem.

**Иметь:**

- практические навыки выполнения квантово-химических расчетов с помощью программ HyperChem, анализа результатов расчетов, который включает рассмотрение геометрического строения молекул, их колебательных спектров, молекулярного объема, диаграмм МО, энергии ионизации, зарядов на атомах, дипольных моментов.

## 3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

### 3.1. Компетенции, формированию которых способствует дисциплина

При освоении дисциплины формируются следующие компетенции в соответствии с ФГОС ВО по данному направлению подготовки:

б) общепрофессиональные (ОПК):



Основная профессиональная образовательная программа  
04.04.01 Химия  
(Инноватика в химии и химическом образовании)

способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения (ОПК-1)

способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук (ОПК-2)

способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности (ОПК-3)

### **3.2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с индикаторами достижения формируемых компетенций**

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

**Знать:** основы квантовой механики и квантовой химии для критического анализа литературных данных и результатов собственного исследования (ОПК-1); современные методы квантово-химических расчетов и методики интерпретации их результатов для разнообразных классов химических соединений (ОПК-3); основные особенности и возможности современных программ для квантово-химических расчетов, способы и методы поиска информации в электронных базах NIST, SDBS, BSE и банке кристаллографических данных CCDC (ОПК-1); методику составления плана исследований на основе анализа литературы по сформулированной тематике, методику выбора вариантов расчетов для квантово-химического исследования (ОПК-2, ОПК-3)

**Уметь:** анализировать научную литературу с целью выбора направления исследования по предлагаемой теме (ОПК-2), использовать сравнительный метод для установления корреляций между молекулярными дескрипторами в ряду сходственных соединений, выполнять расчеты геометрического строения, частот колебаний и электронных характеристик молекул квантово-химическими методами разного уровня, описывать полученные результаты и найденные закономерности, формулировать выводы, применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов (ОПК-1, ОПК-3).

**Иметь:** навыки анализа научной литературы с целью выбора направления исследования по предлагаемой теме, использовать сравнительный метод для установления корреляций между молекулярными дескрипторами в ряду сходственных соединений (ОПК-1, ОПК-3), навыки исследования свойств молекулярных систем методами квантовой механики и квантовой химии при решении теоретических задач химии (ОПК-3), навыки выполнения расчетов геометрического строения, частот колебаний и электронных характеристик молекул квантово-химическими методами разного уровня (ОПК-1, ОПК-3); навыки краткого и развернутого описания результатов теоретического исследования, выявленных закономерностей и особенностей в рядах исследуемых соединений (ОПК-1, ОПК-2).

### **4. Объем и содержание дисциплины**

Объем дисциплины составляет 11 зачетных единиц, 396 часов.

В первом семестре – 3 зачетные единицы, 108 часов, зачет

во втором семестре – 4 зачетные единицы, 144 часа, зачет с оценкой

в третьем семестре – 4 зачетные единицы, 144 часа, экзамен

#### **4.1. Содержание дисциплины по разделам (темам), соотнесенное с видами и трудоемкостью занятий лекционно-семинарского типа**

Объем иной контактной работы и самостоятельной работы обучающегося по дисциплине указан в учебном плане образовательной программы.



Основная профессиональная образовательная программа  
04.04.01 Химия  
(Инноватика в химии и химическом образовании)

№ п/ п	Разделы (темы) дисциплины	Семестр	Виды занятий, их объем		Формы текущего контроля успеваемости
			Занятия лекцион- ного типа	Занятия семинар- ского типа	Формы промежуточной аттестации
1.	Методы квантово-химических расчетов. Метод Хартри-Фока. Способы решения уравнения ХФР.	1	6	4	Отчет по лабораторной работе 1.
2.	Ab initio методы, учитывающие электронную корреляцию. Метод функционала плотности.	1	4	4	Отчет по лабораторной работе 2.
3.	Основные концепции и способы расчетов.	1	4	4	Отчет по лабораторной работе 3.
	Итого за семестр		14	12	Зачет
1.	Симметрия в химии.	2	2	2	Отчет по лабораторной работе 1.
2.	Принципы качественной теории молекулярных орбиталей.	2	2	2	Отчет по лабораторной работе 2.
3.	NBO-анализ распределения электронной плотности в молекуле.	2	4	4	Отчет по лабораторной работе 3.
4.	Индивидуальное научно-исследовательское задание	2	6	4	Отчет-презентация
	Итого за семестр:		14	12	Зачет с оценкой
1.	Развитие представлений о геометрической конфигурации молекул.	3	2	2	Отчет по лабораторной работе 1.
2.	Виды структурной нежесткости.	3	4	4	Отчет по лабораторным работам 2-3.
3.	Квантово-химическое исследование структурной нежесткости органических молекул.	3	6	4	Отчет по научно-исследовательской работе.
	Итого за семестр:		12	10	Экзамен
	Итого по дисциплине:		40	34	

**4.2. Развернутое описание содержания дисциплины по разделам (темам)**  
**Структура и содержание теоретической части**

Таблица 1.



Основная профессиональная образовательная программа  
04.04.01 Химия  
(Инноватика в химии и химическом образовании)

№ раздела	Основное содержание лекций
	<b>1 семестр</b>
1	<b>Раздел 1.</b> Методы квантовохимических расчетов. Уравнение Шредингера для молекул. Гамильтониан. Приближение Борна-Оппенгеймера. Метод Хартри-Фока. Спин-МО. Многоэлектронная волновая функция. Метод МО-ЛКАО. Вариационный принцип. Уравнение Хартри-Фока-Рутаана. Метод самосогласованного поля.
2	<b>Раздел 2.</b> Способы решения уравнения ХФР. Ограниченный и неограниченный методы ХФ. Ограниченный метод ХФ для открытых оболочек. Полуэмпирические и неэмпирические методы. Использование и ограничения полуэмпирических методов. Решение уравнения ХФР неэмпирическими методами. Базисы АО. Минимальный базис, валентно расщепленный базис, поляризационные и диффузные функции, базисы атомов пост-третьего периода, корреляционно-согласованные базисы. ХФ предел. Эффективные остовные потенциалы.
3	<b>Раздел 3.</b> Ab initio методы, учитывающие электронную корреляцию - пост-ХФ методы. Метод конфигурационного взаимодействия. Метод связанных кластеров. Метод многочастичной теории возмущений.
4	<b>Раздел 4.</b> Метод функционала плотности. Обменные и корреляционные функционалы. Гибридные методы.
5	<b>Раздел 5.</b> Основные концепции и способы расчетов. Ограничения и относительная точность разных квантово-химических методов. Программы для квантово-химических расчетов и визуализации результатов расчетов.
	<b>2 семестр</b>
1	<b>Раздел 1.</b> Симметрия в химии. Операции и элементы симметрии молекул. Оси и плоскости симметрии, центр симметрии. Зеркально-поворотные и поворотно-инверсионные оси. Точечные группы симметрии молекул. Типы точечных групп. Таблицы характеров. Типы симметрии. Классификация нормальных колебаний по типам симметрии. Правила отбора в колебательных спектрах. Классификация канонических молекулярных орбиталей по типам симметрии. Влияние симметрии равновесной конфигурации ядер на свойства молекул и их динамическое поведение (дипольный момент, моменты инерции, формы нормальных колебаний и т.п.)
2	<b>Раздел 2.</b> Принципы качественной теории молекулярных орбиталей. Углубленное рассмотрение. Взаимодействие двух и нескольких орбиталей. Орбитали связей и групповые орбитали. Локализованные МО. Концепция гибридных атомных орбиталей. Гибридизация и пространственная направленность химических связей. Неэквивалентные гибридные орбитали. Орбитали циклических систем. Орбитали металлоорганических фрагментов.



Основная профессиональная образовательная программа  
04.04.01 Химия  
(Инноватика в химии и химическом образовании)

3	<p><b>Раздел 4.</b> Строение координационных соединений. Координационная связь. Типы координационных полиэдров. Теория кристаллического поля. Качественные аспекты теории. Расщепление энергии d-АО в полях различной симметрии. Величина расщепления термов. Комплексы слабых и сильных полей. Спектроскопический ряд лигандов. Энергия стабилизации кристаллическим полем. Объяснение изменений термодинамических, магнитных и других свойств в рядах соединений переходных элементов с позиций теории кристаллического поля.</p> <p>Теория поля лигандов. Применение теории молекулярных орбиталей для описания электронного строения координационных соединений. МО координационных соединений с лигандами, имеющими <math>\sigma</math>-МО. МО координационных соединений с лигандами, имеющими <math>\sigma</math>-МО и <math>\pi</math>-МО. <math>\pi</math>-Комплексы и металлоцены. Правило 18 электронов. Деформация координационных полиэдров и эффекты Яна-Теллера.</p>
4	<p><b>Раздел 5.</b> NBO-анализ распределения электронной плотности в молекуле. Анализ заселенностей АО. Заряды на атомах. Электронная конфигурация атома в молекуле. Порядки связей. «Валентность» атома в молекуле. Естественные МО. Их состав. Гибридизация АО и двухцентровые двухэлектронные МО. Орбитальные эффекты, стабилизирующие определенную конфигурацию молекулы. Энергия орбитальных взаимодействий.</p>
	<b>3 семестр</b>
1	<p><b>Раздел 1.</b> Развитие представлений о геометрической конфигурации молекул. Жесткие молекулы. Геометрические параметры молекул. Малые колебания ядер вблизи положения равновесия.</p> <p>Структурно нежесткие молекулы. Колебания с большими амплитудами. Потенциальные поверхности нежестких молекул. Стационарные точки на ППЭ. Барьеры внутримолекулярных превращений.</p>
2	<p><b>Раздел 2.</b> Виды структурной нежесткости. Поворотная изомерия и внутреннее вращение в молекулах. Потенциальная функция и барьер внутреннего вращения. Конформационный анализ цвиттер-ионной формы молекул глицина и аланина.</p>
3	<p><b>Раздел 3.</b> Квантово-химическое исследование структурной нежесткости. Расчет потенциальных функций внутримолекулярных перегруппировок. Определение числа конформеров, их относительной энергии и константы конформационных равновесий. Определение энергии и геометрического строения переходного состояния. Выявление причин, стабилизирующих строение конформеров.</p>

### 5. Образовательные технологии

При реализации дисциплины «Компьютерное моделирование и структурная химия» используются:

- проектная технология;
- рейтинговая технология;
- технология развития критического мышления;
- технология учебной дискуссии;
- проблемное обучение.

Информационные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине:

- технологии смешанного обучения.



Основная профессиональная образовательная программа  
04.04.01 Химия  
(Инноватика в химии и химическом образовании)

Лабораторные занятия: **активно-деятельный подход** к обучению студентов по дисциплине «Компьютерное моделирование и структурная химия» реализуется в индивидуальном выполнении практических заданий, по тематике, совпадающей с материалом лекций.

Все практические задания выполняются с использованием ПК и программ для квантово-химических расчетов HyperChem, Gaussian и программой визуализации результатов квантово-химических расчетов ChemCraft. Отчеты сдаются студентами в электронном виде. После выполнения всех практических заданий студент в первом семестре самостоятельно выполняет зачетное задание, которое включает все рассмотренные в лекциях вопросы, и использует навыки, приобретенные при выполнении практических заданий. Отчет по зачетному заданию оформляется в виде презентации.

Во втором семестре после выполнения всех практических заданий студент выполняет научно-исследовательский проект, оформляет его результаты в виде расчетной части к квалификационной работе, а также тезисов докладов и презентации. К экзамену студенты оформляют результаты работы над индивидуальным заданием, в котором применяют все изученные методики.

#### **6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся**

При самостоятельной работе (СРС) обучающимся предлагается использовать материалы лекций, литературу из доступных электронно-библиотечных систем и различных электронных ресурсов. Текущая и опережающая СРС, направленная на углубление и закрепление знаний, а также развитие практических умений заключается в:

- работе обучающихся с лекционным материалом, поиск и анализ литературы и электронных источников информации по заданной проблеме;
- подготовке отчетов к лабораторным работам;
- подготовке к отчету-презентации к зачетному заданию;
- подготовке к экзамену.

Методический материал по обеспечению самостоятельной работы студентов приводится в приложении 1 к РП.

#### **7. Характеристика оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине**

В качестве оценочных средств для проведения текущего контроля выступают: требования к представлению отчетов по практическим работам и индивидуальному заданию.

В качестве итогового контроля в **первом и втором семестре** используется отчет в виде презентации, в которой представлены результаты зачетного задания.

Критерии и шкала оценки:

- оценка «зачет» выставляется студенту при наличии отчетов по практическим работам и успешного выступления с презентацией результатов зачетного индивидуального задания.

В качестве оценочных средств для проведения текущего контроля в **третьем семестре** выступают: требования к представлению отчетов по практическим работам, вопросы и практические задания к экзамену.

В качестве итогового контроля выступает экзамен смешанной формы: отчет в виде тезисов доклада и/или презентация, в которой представлены результаты индивидуального задания, а также устные ответы на вопросы (из списка вопросов к экзамену).

- оценка «отлично» выставляется студенту, если все предъявляемые требования выполнены;



Основная профессиональная образовательная программа  
04.04.01 Химия  
(Инноватика в химии и химическом образовании)

- оценка «хорошо» выставляется студенту, если большинство предъявляемых требований выполнена;
- оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если предъявляемые требования выполнены частично;
- оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, если предъявляемые требования не выполнены или большинство требований не выполнено.

## 8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### А) Основная литература:

1. Ведринский Р.В. Квантовая механика [Электронный ресурс] : учебник / Ведринский Р.В. – Ростов н/Д: ЮФУ, 2009 – 384 с. Режим доступа:  
<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=240937>
2. Ефремов Ю.С. Квантовая механика [Электронный ресурс] : учебное пособие / Ефремов Ю.С. – М.-Берлин: Директ-Медиа, 2015. – 457 с. Режим доступа:  
<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=273446>
3. Крашенинин В.И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам [Электронный ресурс] : учебное пособие / Крашенинин В.И. , Газенаур Е.Г. , Кузьмина Л.В. – Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2012. – 56 с. Режим доступа:  
<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678>
4. Гиричева Н. И., Федоров М. С. Избранные главы квантовой химии : учеб. пособие / Н. И. Гиричева, М. С. Федоров. – Иваново : Иван. гос. унт, 2021. – 108 с. ISBN 9785780713555  
Режим доступа:  
[http://lib.ivanovo.ac.ru:81/elib/dl/biology/ucheb/giricheva\\_2021.htm/view](http://lib.ivanovo.ac.ru:81/elib/dl/biology/ucheb/giricheva_2021.htm/view)

### Дополнительная литература:

1. Магазинников, А.Л. Введение в квантовую механику: учебное пособие / А.Л. Магазинников, В.А. Мухачёв. - Томск: Эль Контент, 2010. - 112 с.: ил.,табл., схем. - ISBN 978-5-4332-0046-3; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=208685>
2. Карлов, Н.В. Начальные главы квантовой механики / Н.В. Карлов, Н.А. Кириченко. - Москва: Физматлит, 2006. - 360 с. - ISBN 5-9221-0538-8; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=68397>

### Б) программное обеспечение и Интернет-ресурсы

Система электронной поддержки образовательного процесса «Мой университет»  
<https://uni.ivanovo.ac.ru>

Профессиональные базы данных и информационно-справочные системы:

ЭБС «Университетская библиотека онлайн» [www.biblioclub.ru](http://www.biblioclub.ru)

Электронная библиотека ИвГУ <http://lib.ivanovo.ac.ru>

Электронный каталог НБ ИвГУ <http://lib.ivanovo.ac.ru/index.php/ek>

Кембриджская база данных онлайн <https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures/> и оффлайн

База спектральных данных SDBS [https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/cre\\_index.cgi](https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/cre_index.cgi)

База данных NIST <https://webbook.nist.gov/chemistry/>

Программное обеспечение: операционная система Microsoft Windows, пакет офисных программ Microsoft Office (Libre Office), интернет-браузер Yandex Browser.

- программа Origin для построения графиков функций и выполнения МНК-анализа
- программы для расчета геометрических и электронных характеристик молекул HyperChem и Gaussian





Основная профессиональная образовательная программа  
04.04.01 Химия  
(Инноватика в химии и химическом образовании)

---

- программа для визуализации результатов квантово-химических расчетов ChemCraft
- программа для математических расчетов и моделирования PTC MathCAD Prime
- файловый менеджер FAR manager

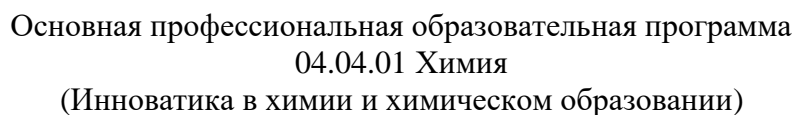
## **9. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

Учебные аудитории:

- для проведения занятий лекционного типа с комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения, служащими для предоставления учебной информации большой аудитории;
- для проведения занятий семинарского типа, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации с комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения;

Помещение для самостоятельной работы, оснащенное комплектом специализированной учебной мебели, компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в ЭИОС.

Демонстрационное оборудование и учебно-наглядные пособия для занятий лекционного типа, обеспечивающие тематические иллюстрации: демонстрационное оборудование (модели, макеты, электронные пособия (презентации)).



Программа обновлена  
протокол заседания кафедры № 1 от 30.08.2023 г.  
Согласовано:  
Руководитель ОП Т.П. Кустова