



Основная профессиональная образовательная программа  
04.06.01 Химические науки  
(Органическая химия)

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

**ИВАНОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

Кафедра органической и физической химии

ОДОБРЕНО:

Руководитель ОП

(подпись)

Т.П. Кустова

« 4 » 05 20 17 г.

**Рабочая программа дисциплины**

Компьютерное моделирование маршрутов реакций

Уровень высшего образования:	Подготовка кадров высшей квалификации
Квалификация выпускника:	Исследователь. Преподаватель-исследователь
Направление подготовки:	04.06.01 Химические науки
Направленность (профиль) образовательной программы:	Органическая химия

Иваново



## 1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины "Компьютерное моделирование маршрутов реакций" является подготовка аспирантов для научно-исследовательской деятельности, связанной с компьютерным моделированием маршрутов органических реакций путем развития у них личностных качеств и формирования общепрофессиональных и профессиональных компетенций в соответствии с ФГОС ВО.

## 2. Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина "Компьютерное моделирование маршрутов реакций" относится к вариативной части ОП и является дисциплиной по выбору. Аспирант, приступающий к изучению дисциплины, должен обладать знаниями, умениями, навыками, полученными ранее в ходе изучения дисциплин: "Органическая химия", "Строение и реакционная способность органических соединений", "Биохимия", "ВМС", "Аналитическая химия" и "Физическая химия".

Для освоения данной дисциплины обучающийся должен:

Знать:

основные понятия теоретической органической химии, краткие исторические сведения о развитии органической химии, роль российских ученых в развитии этой науки, место органической химии среди других естественнонаучных дисциплин и ее вклад в развитие современной цивилизации, значение и сферы применения основных классов органических соединений;

меры безопасности при работе с органическими веществами;

номенклатуру основных классов органических соединений, принципы классификации органических соединений, химические свойства и способы получения различных классов органических соединений, механизмы органических реакций, методы решения задач в рамках общего курса органической химии;

основные методы выделения и очистки органических соединений, приборы и оборудование, необходимые для проведения синтезов в лабораторных условиях, аналитические приемы при работе с органическими веществами, методы идентификации органических соединений.

Уметь:

обосновано проводить поиск схемы синтеза в химической литературе, выбирать схему синтеза, выделения и очистки органического соединения, использовать теоретические основы дисциплины в объеме, необходимом для решения типовых задач;

готовить и безопасно проводить химический эксперимент по изучению свойств и идентификации различных классов органических веществ;

использовать знание химических свойств органических соединений различных классов для установления связи между ними, описывать свойства органических соединений, используя знание свойств их функциональных группы, составлять схемы и уравнения химических реакций для веществ разных классов;

осуществлять на практике безопасный анализ и идентификацию органических веществ;

обосновывать применение органических веществ в промышленности, проводить исследования в соответствии с профессиональными компетенциями, проводить обработку результатов эксперимента и оценивать их в сравнении с литературными данными.

Владеть:

опытом описания и анализа органических превращений на основе представлений о составе, строении и свойствах органических веществ – представителей основных классов органических соединений углеводов, гомофункциональных соединений, гетерофункциональных соединений, гетероциклических соединений;



Основная профессиональная образовательная программа  
04.06.01 Химические науки  
(Органическая химия)

приёмами органического синтеза и физико-химических методов анализа органических соединений;

приёмами безопасной работы в лаборатории органического синтеза.

Дисциплина является предшествующей для изучаемой в 5-м семестре дисциплины "Химия биологически активных органических соединений", а также для научно-исследовательской деятельности и практики по получению профессиональных умений и опыта профессиональной деятельности (педагогической практики).

### **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:

а) общепрофессиональные (ОПК):

способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);

б) профессиональные (ПК):

готовность использовать современные экспериментальные методы для установления структуры и исследования реакционной способности органических соединений (ПК-1);

способность проектировать и осуществлять направленный синтез органических соединений с полезными свойствами (ПК-2).

#### **3.2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с формируемыми компетенциями**

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

Знать:

современные положения теории органических реакций, концепции теоретической органической химии, механизмы органических реакций и методы их диагностики (ОПК-1);

современные возможности, области применения и перспективы применения математических и компьютерных методов в органической химии при диагностике механизмов органических реакций (ОПК-1),

принципы организации, интерфейс и способы использования программного обеспечения для проведения, визуализации и анализа квантово-химических вычислений (ПК-1);

методы и способы интерпретации результатов компьютерного эксперимента (ПК-2);

современные источники специализированной химической информации и способы ее поиска (ОПК-1).

Уметь:

правильно классифицировать и диагностировать вероятные механизмы органических реакций (ПК-1);

конструктивно обосновывать выбор теоретических методов и квантово-химических базисов для целенаправленного решения задач по диагностике механизмов органических реакций (ПК-1);

целесообразно использовать программное обеспечение для проведения расчетов, визуализации, интерпретации и анализа результатов квантово-химических вычислений (ОПК-1);

правильно и обоснованно интерпретировать результаты квантово-химического моделирования путей реакций и структур переходных состояний (ПК-2);

проводить поиск специфической химической информации в специализированных базах данных (ОПК-1).



Основная профессиональная образовательная программа  
04.06.01 Химические науки  
(Органическая химия)

Владеть:

опытом самостоятельного выполнения компьютерного моделирования маршрутов органических реакций (ОПК-1, ПК-1, ПК-2).

#### 4. Объем и содержание дисциплины

Объем дисциплины составляет 2 зачетные единицы (72 академических часа).

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

№ п/п	Разделы (темы) дисциплины	Семестр	Виды занятий, их объем (в ак. часах, по очной форме обучения)		Формы текущего контроля успеваемости (по очной форме обучения)  Формы промежуточной аттестации
			Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	
1.	Вводный. Введение в проблематику дисциплины, представление рабочей программы, осмысление требований к организации процесса обучения, самостоятельной работы и форм аттестации	7	2	2	Входная диагностика: тест с последующим обсуждением результатов. Список вопросов, интересующих обучающегося по содержанию дисциплины (сдается в письменном виде)
2.	Современные проблемы применения математических методов в химии. Тенденции развития вычислительной техники	7	2	2 практ. занятие	
3.	Механизмы органических реакций. Граничные орбитали. Теория возмущений	7	2	2 практ. занятие	
4.	Поверхность потенциальной энергии. Правила отбора Циммермана и Вудворда-Хоффмана. Путь реакции с минимальной энергией. Принцип наименьшего перемещения. Принципы Белла-Эванса-Поляни (БЭП). Постулат Хэммонда	7	4	4 практ. занятие	Коллоквиум
5.	Методы квантовой химии для расчета ППЭ. Полуэмпирические методы. Неэмпирические методы. Базисы в неэмпирических расчетах	7	2	2 практ. занятие	
6.	Методы учета электронной корреляции. Теория функционала плотности Расчет систем с открытыми и замкнутыми электронными оболочками	7	2	2 практ. занятие	
7.	Учет сольватационных эффектов в органических реакциях	7	2	4 практ. занятие	Коллоквиум



Основная профессиональная образовательная программа  
04.06.01 Химические науки  
(Органическая химия)

8.	Заключительный. Подведение и анализ промежуточных результатов освоения дисциплины	7	2		
Итого:			18	18	Зачет с оценкой

#### 4.2. Развернутое описание содержания дисциплины по разделам (темам)

Современные проблемы применения математических методов в химии. Тенденции развития вычислительной техники.

Механизмы органических реакций. Граничные орбитали. Теория возмущений.

Поверхность потенциальной энергии. Правила отбора Циммермана и Вудворда-Хоффмана. Путь реакции с минимальной энергией. Принцип наименьшего перемещения. Принципы Белла-Эванса-Поляни (БЭП). Постулат Хэммонда.

Методы квантовой химии для расчета ППЭ. Полуэмпирические методы. Неэмпирические методы. Базисы в неэмпирических расчетах.

Методы учета электронной корреляции. Теория функционала плотности Расчет систем с открытыми и замкнутыми электронными оболочками.

Использование программы Hyperchem для установления маршрутов и механизмов реакций. Построение 2D-потенциальных кривых и 3D-потенциальных поверхностей с помощью встроенной процедуры Potential программы Hyperchem. Выбор координаты реакции. Назначение именованных обозначений. Работа с диалоговым окном Potential. Интерпретация полученных результатов. Маршрут реакции. Переходное состояние реакции. Расчет переходного состояния реакции с помощью встроенной процедуры Transition State: назначение и использование диалогового окна Reaction Map, выбор алгоритма расчета в окне Transition State. Использование колебательного спектра системы для подтверждения истинности найденного переходного состояния.

Использование программы Firefly для установления механизмов реакций. Расчет 3D-поверхности потенциальной энергии. Создание файла данных mytask.inp. Структура файла результатов mytask.out. Поиск седловых точек на потенциальной поверхности. Применение процедуры Saddle. Использование процедуры IRC.

Учет сольватационных эффектов в органических реакциях.

#### 5. Образовательные технологии

При проведении занятий используются образовательные технологии:

- ✓ технология проблемного обучения,
- ✓ технология развития критического мышления,

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине: технологии смешанного обучения.

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

Самостоятельная работа обучающихся в рамках курса «Компьютерное моделирование маршрутов реакций» заключается в подготовке к коллоквиумам и к практическим занятиям с использованием методических указаний, расположенных на сайте библиотеки ИвГУ (электронная библиотека):

[http://lib.ivanovo.ac.ru/elib/dl/biology/metod/krilov\\_2011\\_2.htm](http://lib.ivanovo.ac.ru/elib/dl/biology/metod/krilov_2011_2.htm).

Полностью весь 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



Основная профессиональная образовательная программа  
04.06.01 Химические науки  
(Органическая химия)

Предусмотрены коллоквиумы по базовым разделам курса, собеседования по материалам периодических изданий, выбранным для самостоятельного изучения.

Форма промежуточной аттестации – зачет с оценкой. Форма проведения зачета: представление и защита портфолио компетенций аспиранта, подтверждающего развитие ОПК и ПК в соответствии с ФГОС ВО соответствующего направления подготовки.

Типовые варианты заданий для зачёта представлены в фонде оценочных средств (Приложение 2).

## 8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Основная литература:

1. Самуилов, Я.Д. Реакционная способность органических соединений : учебное пособие / Я.Д. Самуилов, Е.Н. Черезова ; Министерство образования и науки РФ, Федеральное агентство по образованию, Государственное образовательное учреждение Высшего профессионального образования Казанский государственный технологический университет. - Казань : Издательство КНИТУ, 2010. - 430 с. : ил., табл., схем. - Библиогр. в кн.. - ISBN 978-5-7882-0941-8 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=259047>

2. Устынюк, Ю.А. Лекции по органической химии / Ю.А. Устынюк. - Москва : Техносфера, 2015. - Ч. 1. Вводный концентр. - 504 с. : ил., табл., схем. - (Мир химии). - Библиогр. в кн.. - ISBN 978-5-94836-430-8 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=444861>

Дополнительная литература:

1. Ким, А.М. Органическая химия : учебное пособие / А.М. Ким ; Министерство образования Российской Федерации, Новосибирский Государственный Педагогический Университет. - 4-е изд., испр. и доп. - Новосибирск : Сибирское университетское издательство, 2004. - 848 с. - ISBN 5-94087-156-9 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=57255>

2. Денисов, В.Я. Стереохимия органических соединений : учебное пособие / В.Я. Денисов, Д.Л. Мурышкин, Т.Н. Грищенко. - 2-е изд., испр. и доп. - Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2013. - 228 с. - ISBN 978-5-8353-1526-0 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232336>

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. <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678>

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

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>

Международные реферативные базы данных:

WoS Сублицензионный договор № WoS/280 "02" апреля 2018 г. (до 31.12.2018 г.)



Основная профессиональная образовательная программа  
04.06.01 Химические науки  
(Органическая химия)

Springer, Nature: Исходящее письмо от РФФИ от 21/09/2017 №857. Ответное письмо ИВГУ на бланке от 27.09.2017 №16-784. Доступ с 01/01/2018: Springer Journals, Springer Protocols, Springer Materials, Springer Reference, Nature Journals.

Программное обеспечение: операционная система Microsoft Windows, пакет офисных программ Microsoft Office и(или) LibreOffice, интернет-браузер Microsoft Edge и(или) Yandex Browser, система электронной поддержки образовательного процесса «Мой университет» <https://uni.ivanovo.ac.ru>, HyperChem, Firefly.

## **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;

Лаборатория, оснащенная лабораторным оборудованием, 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: модели, макеты, демонстрационные устройства; печатные пособия (таблицы, схемы).

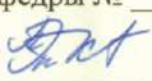


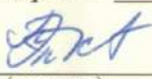


Основная профессиональная образовательная программа  
04.06.01 Химические науки  
(Органическая химия)

**Авторы рабочей программы дисциплины:** профессор кафедры органической и физической химии, доктор химических наук Крылов Е.Н., профессор кафедры органической и физической химии, доктор химических наук Кочетова Л.Б.

Программа рассмотрена и утверждена на заседании кафедры органической и физической химии « 4 » 05 20 17 г., протокол № 9

Программа обновлена  
протокол заседания кафедры № 10 от « 17 » 05 20 18 г.  
Согласовано:  
Руководитель ОП  Т.П. Кустова  
(подпись)

Программа обновлена  
протокол заседания кафедры № 1 от « 30 » 08 20 19 г.  
Согласовано:  
Руководитель ОП  Т.П. Кустова  
(подпись)