

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования "Пермский
государственный национальный исследовательский
университет"**

Кафедра органической химии

Авторы-составители: **Шуров Сергей Николаевич**
Байбародских Даниил Владимирович

Рабочая программа дисциплины
ОСНОВЫ КОМПЬЮТЕРНОЙ ХИМИИ
Код УМК 62456

Утверждено
Протокол №1
от «31» августа 2021 г.

Пермь, 2021

1. Наименование дисциплины

Основы компьютерной химии

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина входит в вариативную часть Блока « С.1 » образовательной программы по направлениям подготовки (специальностям):

Специальность: **04.05.01** Фундаментальная и прикладная химия
направленность Программа широкого профиля

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

В результате освоения дисциплины **Основы компьютерной химии** у обучающегося должны быть сформированы следующие компетенции:

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия (направленность : Программа широкого профиля)

ПК.1 Способен планировать и проводить фундаментальные и прикладные работы по сформулированной тематике, владеет навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований

Индикаторы

ПК.1.3 Владеет навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований

4. Объем и содержание дисциплины

Направления подготовки	04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия (направленность: Программа широкого профиля)
форма обучения	очная
№№ триместров, выделенных для изучения дисциплины	13
Объем дисциплины (з.е.)	3
Объем дисциплины (ак.час.)	108
Контактная работа с преподавателем (ак.час.), в том числе:	42
Проведение лекционных занятий	14
Проведение лабораторных работ, занятий по иностранному языку	28
Самостоятельная работа (ак.час.)	66
Формы текущего контроля	Защищаемое контрольное мероприятие (3) Итоговое контрольное мероприятие (1)
Формы промежуточной аттестации	Зачет (13 триместр)

5. Аннотированное описание содержания разделов и тем дисциплины

Основы компьютерной химии. Первый семестр

1. Основные положения квантовой химии

В разделе в краткой форме изложены основы квантовой механики, ее основные уравнения, используемые при расчетах атомов и молекул. Студенты знакомятся с приближенным описанием строения и электронного распределения в молекулах.

Основные положения квантовой механики.

Уравнение Шредингера. Расчеты атомов: водорода и более сложных. Методы ССП Хартри и Хартри-Фока

Расчеты молекул.

Приближение Борна-Оппенгеймера. Метод МО ЛКАО. Неэмпирические и полуэмпирические расчеты

2. Расчетные методы квантовой химии

В разделе студенты знакомятся с различными приближениями, учитываемыми в расчетах молекул: пи-электронный метод Хюкеля, валентные методы - CNDO, INDO, MINDO, MNDO, AM1, PM3, M6, RM1, а также с неэмпирическими методами.

Неэмпирические методы СП МО ЛКАО. Базисные наборы: 3G, 3-21G, 4-31G, 6-31G (d)

Раздел посвящен неэмпирическим (ab initio) квантово-химическим расчетам. Рассматривается представление атомных орбиталей в виде набора гауссовых функций (базисных наборов), в том числе двухэкспоненциальных и валентно-расщепленных. Обсуждается связь точности расчета с гибкостью базисного набора.

Полуэмпирические методы ССП МЛ ЛКАО: CNDO/2, INDO, MINDO/3, MNDO, AM1, PM3, RM1, PM6

Рассматриваются приближенные (полуэмпирические) методы расчета молекул, параметризация по воспроизводимым свойствам. Обсуждается иерархия полуэмпирических методов, а также точность методов основанных на приближении НДП и ПДДП. Приводится соответствие расчетных схем для воспроизведения конкретного свойства

3. Работа с современными пакетами квантово-химических программ

Современные пакеты квантово-химических программ: GAUSSIAN, GAMESS, ORCA, NWChem, SPARTAN, MOPAC

В данном разделе студенты знакомятся с существующими пакетами квантово-химических программ, их разработчиками, возможностями и способами приобретения.

Подготовка массивов исходных данных. Ключевые слова, Z-матрицы

В разделе рассматриваются способы задания геометрии молекулярных систем с помощью Z-матриц Дьюара, декартовых координат или с экрана монитора. Обсуждаются ключевые слова, запускающие расчет, позволяющие следить за ходом вычислений в режиме реального времени, регламентирующие вывод на печать интересующих результатов

Проведение расчетов, формирование файла с результатами

В разделе рассматривается проведение расчетов с использованием разных пакетов квантово-химических программ, формирование файла выдачи результатов и его распечатки.

4. Расчеты геометрического и электронного строения молекул на ПК

В ходе лабораторных занятий студенты знакомятся с приемами работ на ПК применительно к различным пакетам квантово-химических программ (MOPAC-2012), GAMESS(Firefly)

Проведение тестовых расчетов молекул неорганических соединений: серной кислоты, ортофосфорной кислоты, трифторида бора, пентахлорида фосфора

В ходе лабораторных занятий студенты проводят расчеты молекул неорганических соединений с помощью пакета программ MOPAC-2012 методами AM1, RM3 (для молекул, содержащих атомы элементов второго и третьего периодов), RM6 (для молекул, содержащих дополнительно элементы четвертого периода)

Проведение тестовых расчетов молекул органических соединений: метана, этана этилена, ацетилен, метанола, формальдегида, ацетона, диметилдформамида

В ходе лабораторных занятий студенты проводят неэмпирические расчеты (пакет программ GAMESS(Firefly) молекул органических соединений с базисными наборами 3-21G, 6-31G(d), 6-311G(d)

Проведение тестовых расчетов молекул аналитических реагентов: салициловой кислоты, диметилглиоксима, 8-оксихинолина.

В ходе лабораторных работ студенты проводят расчеты молекул аналитических реагентов полуэмпирическими методами (AM1, RM1 - пакет программ MOPAC-2012) и неэмпирическими методами базисы 3-21G, 6-31G(d) - пакет программ GAMESS(Firefly)

Проведение тестовых расчетов молекул ингибиторов коррозии тиомочевина, имидазола диметилтеллура

В ходе лабораторных работ студенты проводят расчеты молекул ингибиторов коррозии полуэмпирическими методами (AM1, RM1 - пакет программ MOPAC-2012) и неэмпирическими методами базисы 3-21G, 6-31G(d) - пакет программ GAMESS(Firefly)

Проведение тестовых расчетов молекул биологически активных соединений: глицина, триптамина, серотонина

В ходе лабораторных работ студенты проводят расчеты молекул биологически активных соединений полуэмпирическими методами (AM1, RM1 - пакет программ MOPAC-2012) и неэмпирическими методами базисы 3-21G, 6-31G(d), 6-311G(d) - пакет программ GAMESS(Firefly)

Контрольное мероприятие N1

В ходе контрольного мероприятия №1 студент должен сформировать Z-матрицу, необходимую для расчета предложенной молекулы с использованием стандартных геометрических характеристик (длин связей, валентных и двугранных углов)

Контрольное мероприятие N2

В ходе контрольного мероприятия №2 студент должен корректно сформировать и ввести массив исходных данных в компьютер, выбрать ключевые слова для проведения конкретного расчета.

Контрольное мероприятие N3

В ходе контрольного мероприятия №3 студент должен запустить расчет с введенными в рамках контрольного мероприятия №2, прокомментировать промежуточные шаги расчета, получить итоговый файл с результатами и корректно проанализировать результат

Итоговое контрольное мероприятие

В ходе итогового контрольного мероприятия студент получает задание на расчет геометрических и электронных характеристик молекулы, формирует массив исходных данных, проводит с ним расчет, представляет его в виде молекулярной диаграммы и проводит интерпретацию

6. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Освоение дисциплины требует систематического изучения всех тем в той последовательности, в какой они указаны в рабочей программе.

Основными видами учебной работы являются аудиторские занятия. Их цель - расширить базовые знания обучающихся по осваиваемой дисциплине и систему теоретических ориентиров для последующего более глубокого освоения программного материала в ходе самостоятельной работы. Обучающемуся важно помнить, что контактная работа с преподавателем эффективно помогает ему овладеть программным материалом благодаря расстановке необходимых акцентов и удержанию внимания интонационными модуляциями голоса, а также подключением аудио-визуального механизма восприятия информации.

Самостоятельная работа преследует следующие цели:

- закрепление и совершенствование теоретических знаний, полученных на лекционных занятиях;
- формирование навыков подготовки текстовой составляющей информации учебного и научного назначения для размещения в различных информационных системах;
- совершенствование навыков поиска научных публикаций и образовательных ресурсов, размещенных в сети Интернет;
- самоконтроль освоения программного материала.

Обучающемуся необходимо помнить, что результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем во время проведения мероприятий текущего контроля и учитываются при промежуточной аттестации.

Обучающимся с ОВЗ и инвалидов предоставляется возможность выбора форм проведения мероприятий текущего контроля, альтернативных формам, предусмотренным рабочей программой дисциплины. Предусматривается возможность увеличения в пределах 1 академического часа времени, отводимого на выполнение контрольных мероприятий.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации.

При проведении текущего контроля применяются оценочные средства, обеспечивающие передачу информации, от обучающегося к преподавателю, с учетом психофизиологических особенностей здоровья обучающихся.

7. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

При самостоятельной работе обучающимся следует использовать:

- конспекты лекций;
- литературу из перечня основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля);
- текст лекций на электронных носителях;
- ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимые для освоения дисциплины;
- лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение из перечня информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине;
- методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

Основная:

1. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для вузов / В. Г. Цирельсон. — М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. — 496 с. : цв. ил. — (Учебник для высшей школы). — ISBN 978-5-9963-0080-8. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система БиблиоТех : [сайт]. <https://bibliotech.psu.ru/Reader/Book/8633>

Дополнительная:

1. Соловьев М. Е., Соловьев М. М. Компьютерная химия / М. Е. Соловьев, М. М. Соловьев. — М.: СОЛОН-Пресс, 2005, ISBN 5-98003-188-X. — 536. — Библиогр.: с. 528-532

9. Перечень ресурсов сети Интернет, необходимых для освоения дисциплины

При освоении дисциплины использование ресурсов сети Интернет не предусмотрено.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

Образовательный процесс по дисциплине **Основы компьютерной химии** предполагает использование следующего программного обеспечения и информационных справочных систем: ڜ презентационные материалы (слайды по темам лекционных и практических занятий); ڜ доступ в режиме on-line в Электронную библиотечную систему (ЭБС) ڜ доступ в электронную информационно-образовательную среду университета.

При освоении материала и выполнении заданий по дисциплине рекомендуется использование материалов, размещенных в Личных кабинетах обучающихся ЕТИС ПГНИУ (**student.psu.ru**).

При организации дистанционной работы и проведении занятий в режиме онлайн могут использоваться:

система видеоконференцсвязи на основе платформы BigBlueButton (<https://bigbluebutton.org/>).

система LMS Moodle (<http://e-learn.psu.ru/>), которая поддерживает возможность использования текстовых материалов и презентаций, аудио- и видеоконтент, а так же тесты, проверяемые задания, задания для совместной работы.

система тестирования Indigo (<https://indigotech.ru/>).

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

1. Лекционные занятия - Аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой (и) или маркерной доской.
2. Практические (семинарские) занятия - Аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой (и) или маркерной доской.
3. Лабораторные занятия - Компьютерный класс, оснащенный персональными ЭВМ и соответствующим программным обеспечением. Состав оборудования определен в Паспорте компьютерного класса
4. Групповые (индивидуальные) консультации - Аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой (и) или маркерной доской.
5. Текущий контроль - Аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой (и) или маркерной доской.
6. Самостоятельная работа - Аудитория для самостоятельной работы, оснащенный компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет», обеспеченный доступом в электронную информационно-образовательную среду университета. Помещения Научной библиотеки ПГНИУ.

Помещения научной библиотеки ПГНИУ для обеспечения самостоятельной работы обучающихся:

1. Научно-библиографический отдел, корп.1, ауд. 142. Оборудован 3 персональными компьютера с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.
2. Читальный зал гуманитарной литературы, корп. 2, ауд. 418. Оборудован 7 персональными

компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

3. Читальный зал естественной литературы, корп.6, ауд. 107а. Оборудован 5 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

4. Отдел иностранной литературы, корп.2 ауд. 207. Оборудован 1 персональным компьютером с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

5. Библиотека юридического факультета, корп.9, ауд. 4. Оборудована 11 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

6. Читальный зал географического факультета, корп.8, ауд. 419. Оборудован 6 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

Все компьютеры, установленные в помещениях научной библиотеки, оснащены следующим программным обеспечением:

Операционная система ALT Linux;

Офисный пакет Libreoffice.

Справочно-правовая система «КонсультантПлюс»

**Фонды оценочных средств для аттестации по дисциплине
Основы компьютерной химии**

**Планируемые результаты обучения по дисциплине для формирования компетенции.
Индикаторы и критерии их оценивания**

ПК.1

Способен планировать и проводить фундаментальные и прикладные работы по сформулированной тематике, владеет навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований

Компетенция (индикатор)	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
ПК.1.3 Владеет навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	знать современные методы компьютерного эксперимента. уметь планировать исследование строения химического соединения. владеть алгоритмом получения и обработки результатов эксперимента для получения необходимой информации.	<p style="text-align: center;">Неудовлетворител</p> не знает современные методы компьютерного эксперимента, не умеет планировать исследование строения химического соединения, не владеет алгоритмом получения и обработки результатов эксперимента для получения необходимой информации. <p style="text-align: center;">Удовлетворительн</p> частично знает современные методы компьютерного эксперимента, ограниченно умеет планировать исследование строения химического соединения, не в полной мере владеет алгоритмом получения и обработки результатов эксперимента для получения необходимой информации. <p style="text-align: center;">Хорошо</p> знает современные методы компьютерного эксперимента, умеет планировать исследование строения химического соединения, частично владеет алгоритмом получения и обработки результатов эксперимента для получения необходимой информации. <p style="text-align: center;">Отлично</p> знает современные методы компьютерного эксперимента, умеет планировать исследование строения химического соединения, владеет алгоритмом получения и обработки результатов эксперимента для получения необходимой информации.

Оценочные средства текущего контроля и промежуточной аттестации

Схема доставки : 9237

Вид мероприятия промежуточной аттестации : Зачет

Способ проведения мероприятия промежуточной аттестации : Оценка по дисциплине в рамках промежуточной аттестации определяется на основе баллов, набранных обучающимся на контрольных мероприятиях, проводимых в течение учебного периода.

Максимальное количество баллов : 100

Конвертация баллов в отметки

«отлично» - от 81 до 100

«хорошо» - от 61 до 80

«удовлетворительно» - от 50 до 60

«неудовлетворительно» / «незачтено» менее 50 балла

Компетенция (индикатор)	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
ПК.1.3 Владеет навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Контрольное мероприятие N1 Защищаемое контрольное мероприятие	Символы химический элементов, усредненные значения межатомных расстояний (длин связей). валентных и двухгранных углов с участием атомов различной гибридизации
ПК.1.3 Владеет навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Контрольное мероприятие N2 Защищаемое контрольное мероприятие	Задание массива исходных данных, выбор базисного набора для решения конкретной задачи, набор команд (ключевых слов) для расчета и вывода на печать необходимой информации
ПК.1.3 Владеет навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Контрольное мероприятие N3 Защищаемое контрольное мероприятие	Команды на проведение расчета, просмотр на экране промежуточных результатов расчета, сохранение полученных результатов и формирование файла-выдачи. интерпретация результатов расчета (геометрические характеристики. заряды атомов и порядки связей)
ПК.1.3 Владеет навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Итоговое контрольное мероприятие Итоговое контрольное мероприятие	Умение задания геометрии молекулярной системы. проведения расчета, формирования массива результатов и построение молекулярной диаграммы

Спецификация мероприятий текущего контроля

Контрольное мероприятие N1

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**
 Условия проведения мероприятия: **в часы самостоятельной работы**
 Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **20**
 Проходной балл: **10**

Показатели оценивания	Баллы
Адекватная нумерация молекулярной системы	5
Адекватное указание двухгранных углов	5
Адекватное указание валентных углов	5
Адекватное указание межатомных расстояний	5

Контрольное мероприятие N2

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**
 Условия проведения мероприятия: **в часы самостоятельной работы**
 Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **20**
 Проходной балл: **10**

Показатели оценивания	Баллы
Корректное введение массива исходных данных в компьютер	5
Корректное ведение команд для вывода на печать оптимальных результатов расчета	5
Корректное введение значение базисного набора для адекватного расчета молекулярной системы	5
Корректное введение параметров точности расчета молекулярной системы	5

Контрольное мероприятие N3

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**
 Условия проведения мероприятия: **в часы самостоятельной работы**
 Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **20**
 Проходной балл: **10**

Показатели оценивания	Баллы
Умение запуска расчета	5
Умение корректно интерпретировать результаты расчета геометрической и электронной структуры молекулярной системы	5
Умение вывода на печать файла с итоговыми результатами	5
Умение адекватно оценивать корректность промежуточных результатов	5

Итоговое контрольное мероприятие

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **1 часа**
 Условия проведения мероприятия: **в часы самостоятельной работы**
 Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **40**
 Проходной балл: **20**

Показатели оценивания	Баллы
Умение формирования массива исходных данных	10

Умение нахождения электронного распределения по результатам расчета	10
Умение нахождения оптимальной геометрии по результатам расчета	10
Умение проведения компьютерного расчета	10