



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ФГБОУ ВО «ИГУ»
Кафедра физической и коллоидной химии

УТВЕРЖДАЮ
Декан химического факультета, доц.
А.И. Вильмс
“ 26 ” мая 2022 г.

Рабочая программа дисциплины

Наименование дисциплины **Б1.О.05 КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В НАУКЕ**

Направление подготовки **04.04.01 - Химия**

Направленность подготовки (профиль): **Научно-технологический.**

Квалификация выпускника – **МАГИСТР**

Форма обучения **очная**

Согласовано с УМК химического
факультета

Протокол № 6 от «26» мая 2022 г.

Председатель _____
А.И. Вильмс .

Рекомендовано кафедрой физической и
коллоидной химии:

Протокол № 7 от «26» мая 2022 г.

И.о. зав. кафедрой _____
Л.Б. Белых

Иркутск 2022 г.

1. Цели и задачи дисциплины (модуля)
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП.
3. Требования к результатам освоения дисциплины (модуля)
4. Объем дисциплины (модуля) и виды учебной работы
5. Содержание дисциплины (модуля)
 - 5.1 Содержание разделов и тем дисциплины (модуля)
 - 5.2 Разделы дисциплины (модуля) и междисциплинарные связи с обеспечиваемыми (последующими) дисциплинами (модулями)
 - 5.3 Разделы и темы дисциплин (модулей) и виды занятий
6. Перечень семинарских, практических занятий, лабораторных работ, план самостоятельной работы студентов, методические указания по организации самостоятельной работы студентов
 - 6.1. План самостоятельной работы студентов
 - 6.2. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов
7. Примерная тематика курсовых работ (проектов) (при наличии)
8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля):
 - а) основная литература;
 - б) дополнительная литература;
 - в) программное обеспечение;
 - г) базы данных, поисково-справочные и информационные системы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)
10. Образовательные технологии
11. Оценочные средства (ОС)

I. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ:

Цели:

формирование углубленных представлений о современных способах применения компьютеров в обучении и научных исследованиях.

Задачи:

- обучение приемам использования сети Интернет для поиска учебной и научной информации;
- ознакомление с принципами организации баз научных и справочных данных и особенностями баз данных по химии;
- обучение приемам хранения и обработки экспериментальных данных с использованием вычислительной техники;
- ознакомление с математическими методами компьютерного моделирования строения, свойств и химических превращений молекулярных систем;
- обучение приемам представления результатов исследования в виде отчетов, научных публикаций и презентаций.

II. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

2.1. Учебная дисциплина Б1.О.05 «Компьютерные технологии в науке» относится к обязательной части программы естественнонаучного цикла.

2.2. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими дисциплинами программы бакалавриата по направлению 04.03.01:

- Б1.О.21 – Информатика
- Б1.О.22 – Информатика и вычислительная техника
- Б1.О.24 – Физическая химия. Электрохимия. Химическая кинетика и катализ
- Б1.О.31 – Квантовая механика
- Б1.В.11 – Работа с химической литературой и информационный поиск
- Б1.В.02 – Математическая теория эксперимента

и магистратуры по направлению 04.04.01

- Б1.О.04 – Квантовая химия
- Б1.В.08 – Информационные технологии в химических исследованиях

2.3. Перечень последующих учебных дисциплин, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной:

- Б1.О.04 – Квантовая химия
- Б2.О.01(Пд) - Преддипломная практика
- Б3.01(Д) - Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы

Содержание курса входит в необходимый минимум профессиональных знаний выпускников химического факультета.

III. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование компетенций (элементов следующих компетенций) в соответствии с ФГОС ВО и ОП ВО по данному направлению подготовки 04.04.01 «Химия», профиль: научно-технологический.

Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с индикаторами достижения компетенций

Компетенция	Индикаторы компетенций	Результаты обучения
ОПК-1. 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-1.2. Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук ОПК-1.3. Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач	Знать: современные тенденции развития компьютерных технологий в области баз данных; особенности использования компьютерных технологий, ПО и баз данных для решения профессиональных задач; Уметь: использовать современное программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук; Владеть: Навыками использования сети Интернет для поиска учебной и научной информации;
ОПК-3. Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	ОПК-3.2. Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности ОПК-3.3. Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием	Знать: современные IT-технологии, для сбора, анализа и представления информации профессиональной деятельности; методы защиты информации основные подходы, используемые для моделирования пространственного и электронного строения молекулярных систем. Уметь: пользоваться стандартными квантово-химическими программами для моделирования строения молекулярных систем; использовать стандартное ПО для решения прямой и обратной задач химической кинетики. Владеть: методами компьютерного моделирования строения, свойств и химических превращений молекулярных систем; приемами представления результатов исследования в виде отчетов, научных публикаций и презентаций.

IV. СОДЕРЖАНИЕ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных единицы, 72 часа,

Форма промежуточной аттестации: зачет

4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)				Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
			Контактная работа преподавателя с обучающимися			Самостоятельная работа	
			Лекции	Семинарские (практические занятия)	Консультации +КСР		
1.	Представление химической информации	2	–	2		2	Проверка практических заданий, УО
2.	Базы данных	2	–	8	1	6	Проверка практических заданий, УО
3.	Статистическая обработка результатов	2	–	2		2	Проверка практических заданий, УО
4.	Методы квантовой химии	2	–	16	3	9	Проверка практических заданий, УО

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
			Контактная работа преподавателя с обучающимися				
5.	Моделирование кинетики сложных реакций	2	–	4		4	Проверка практических заданий, УО
6.	Представление результатов исследований	2	–	2	1	6	Проверка практических заданий, УО
7.	Защита информации.	2	–	2		2	Обсуждение, презентация
Итого часов		2	–	36	5	31	Зачет

4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
	Представление химической информации	Освоение средств ChemSketch		2	ПР-1, итоговая работа	см. список рекомендуемой литературы (7, 15)
	Базы данных	Поиск химической информации средствами ChemSketch		1	ПР-1	см. список рекомендуемой литературы (7, 16)
	Базы данных	Поиск в БД NIST и Scopus Database		1	УО	
	Базы данных	Построение реляционной СУБД		2	ПР-2	см. список рекомендуемой литературы (3,5)
	Базы данных	Анализ однотабличной СУБД средствами Excel		2	ПР-3	см. список рекомендуемой литературы (3,5)
	Статистическая обработка результатов	Подготовка отчета		2	ПР-4	см. список рекомендуемой литературы (1,2,10)
	Методы квантовой химии	Построение ППЭ молекулы воды		2	ПР-6	см. список рекомендуемой литературы (4,12–14)
	Методы квантовой химии	Исследование реакционной способности в ряду замещенных бензола		2	ПР-10, ПР-11	см. список рекомендуемой литературы (4,12–14)

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
	Методы квантовой химии	Выполнение расчетов к итоговому заданию		5	итоговая работа	см. список рекомендуемой литературы (4,12–14)
	Моделирование кинетики сложных реакций	Моделирование каталитической реакции.		1	ПР-12	см. список рекомендуемой литературы (6,14,15)
	Моделирование кинетики сложных реакций	Решение задачи к итоговому заданию		3	итоговая работа	см. список рекомендуемой литературы (6,15,16)
	Представление результатов исследований	Подготовка презентации		2	ПР-14, пр-15	см. список рекомендуемой литературы (4,5)
	Защита информации	Подготовка презентации		2	ПР-15	см. список рекомендуемой литературы (7)
	Выполнение итоговой работы	Выполнение итоговой работы			, итоговая работа	см. список рекомендуемой литературы
Общая трудоемкость самостоятельной работы по дисциплине (час)				31		
Бюджет времени самостоятельной работы, предусмотренный учебным планом для данной дисциплины (час)				31		

4.3 Содержание учебного материала

Содержание разделов и тем дисциплины

1. Представление химической информации.
Специфика представления химической информации. Линейные нотации SMILES, InChi, InChiKey.
Графические редакторы для построения химических 2D- и 3D-структур и их использование для связи с базами данных.
2. Базы данных.
Принципы организации баз научных и справочных данных. Компьютерные технологии в обмене научной информацией; использование сети Интернет для поиска учебной и научной информации; принципы организации баз научных и справочных данных; построение базы данных средствами EXCEL и ACCESS.
3. Статистическая обработка результатов.
Статистическая обработка результатов измерений и принципы проверки научных гипотез и математических моделей.
Средства Microsoft Excel для статистического анализа данных. Множественная линейная регрессия. Надстройка «Поиск решения». Надстройка «Пакет анализа».
4. Вычислительные методы квантовой химии.
Проведение квантовохимических расчетов с использованием программы FireFly.
Визуализация результатов квантовохимических расчетов с помощью программы MASK.
Оптимизация геометрии, расчет колебательных спектров. Влияние базисного набора и уровня учета корреляционных эффектов. Расчет колебательных поправок, оценка теплового эффекта реакции, оценка соотношения изомеров в равновесной смеси.
Поиск переходных состояний. Оценка активационного барьера реакции. Учет влияния растворителя.
Системы с открытыми оболочками. Возбужденные состояния.
Связь электронного строения молекул с их реакционной способностью. Индексы реакционной способности. Заряды на атомах, порядки связей и электростатический потенциал. Граничные орбитали.
5. Моделирование кинетики сложных реакций.
Возможности программы KINET для решения прямой задачи химической кинетики. Ввод кинетической схемы (механизма) реакции. Задание констант скорости. Модификация уравнений математической модели. Задание условий реакции и режима вывода результатов.
Возможности программы KINET для решения обратной задачи химической кинетики.
6. Представление результатов исследований.
Использование компьютерной анимации, графических и математических продуктов для отображения результатов исследований.
7. Защита информации.
Представления о защите информации и информационной безопасности. Информационная безопасность (ИБ) и ее составляющие. Угрозы безопасности информации и их классификация. Основные виды защищаемой информации. Защита информации в локальных компьютерных сетях, антивирусная защита. Специфика обработки конфиденциальной информации в компьютерных системах.

4.3.1. Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ

п/п	№ раздела и темы дисциплины	Наименование семинаров, практических и лабораторных работ	Трудоемкость (час.)	Оценочные средства	Формируемые компетенции
1	2	3	4	5	6
1.	1	Редактор химических формул ChemSketch	2	ПР-1	ОПК-1 ОПК-3
2.	1,2	Открытые и коммерческие базы данных по химии.	2	УО	ОПК-1 ОПК-3
3.	2	Организация реляционной базы данных средствами ACCESS	4	ПР-2	ОПК-1 ОПК-3
4.	2	Обработка однотабличной БД средствами MS EXCEL	2	ПР-3	ОПК-1 ОПК-3
5.	3	Статистическая обработка результатов средствами MS EXCEL	2	ПР-4	ОПК-1 ОПК-3
6.	4	Программа FIREFLY. Ввод исходных данных. Анализ результатов. Визуализация результатов расчета в MASK	1	ПР-5	ОПК-1 ОПК-3
7.	4	Расчеты равновесной геометрии молекул средствами программы FIREFLY	3	ПР-6, ПР-7	ОПК-1 ОПК-3
8.	4	Переходные состояния. Оценка активационного барьера реакции	4	ПР-8	ОПК-1 ОПК-3
9.	4	Системы с открытыми оболочками. Возбужденные состояния.	4	ПР-9	ОПК-1 ОПК-3
10.	4	Учет сольватационных эффектов	2	ПР-8	ОПК-1 ОПК-3
11.	4	Расчет индексов реакционной способности средствами программы FIREFLY	2	ПР-10, ПР-11	ОПК-1 ОПК-3
12.	5	Моделирование кинетики реакций средствами программы KINET	4	ПР-12	ОПК-1 ОПК-3
13.	6,7	Создание презентации средствами PowerPoint	2	ПР-14	ОПК-1 ОПК-3

4.3.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение самостоятельной работы студентов

№ пп/п	Тема	Задание	Формируемая компетенция	ИДК
1	1, 2	Поиск химической информации средствами ChemSketch	ОПК-1 ОПК-3	ОПК-1.2 ОПК-3.2
2	2	Анализ однотобличной СУБД средствами Excel	ОПК-1 ОПК-3	ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.2
3	4	Общая характеристика методов квантовой химии. Выбор базисного набора и уровня учета корреляционных эффектов.	ОПК-1 ОПК-3	ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.2 ОПК-3.3
4	4	Применение методов квантовой химии для анализа строения и реакционной способности молекул	ОПК-1 ОПК-3	ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.2 ОПК-3.3
5	7	Защита информации и информационная безопасность	ОПК-1	ОПК-1.2

4.4. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа студентов, связанная с закреплением теоретического материала в виде решения задач и подготовке к коллоквиумам проводится во внеаудиторное время.

4.4. Примерная тематика курсовых работ (проектов) (при наличии)

Выполнение курсовых работ не планируется

V. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

а) основная литература

1. Информатика [Электронный ресурс] : учеб. для студ. вузов, / под ред. В. В. Трофимова. - ЭВК. - М. : Юрайт : Высш. образование, 2010. - Режим доступа: ЭЧЗ "Библиотек". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-9916-0255-6. - ISBN 978-5-9692-0422.+
2. Кудинов, Ю.И. Основы современной информатики [Электронный ресурс] : учеб. пособие / Ю. И. Кудинов. - Москва : Лань, 2011. - 256 с. - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань". +
3. Кудинов, Ю.И. Практикум по основам современной информатики [Электронный ресурс] / Ю. И. Кудинов, Ф. Ф. Пашенко, А. Ю. Келина. - Москва : Лань, 2011. - 352 с. : табл. - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань".+
4. Кобычев В.Б. Квантовая химия на ПК. Компьютерное моделирование молекулярных систем : учеб.-метод. пособие / В. Б. Кобычев . – Иркутск : Иркут. гос. ун-т, 2006 . – 88 с.+
5. Компьютерное моделирование кинетики сложных химических реакций: учебно-методическое пособие / А. Ф. Шмидт, А. А. Курохтина. - Иркутск: ИГУ, 2016. - 79 с.+
6. Федеральный закон Российской Федерации «Об информации, информационных технологиях и о защите информации» от 27 июля 2006 г. N 149-ФЗ+

б) дополнительная литература

7. Смагунова А.Н. Методы математической статистики в аналитической химии: учеб. пособие / А.Н. Смагунова, О.М. Карпукова. - Иркутск : Изд-во Иркут. гос. ун-та, 2008. - 339 с.+
8. Трофимов А.Б. Введение в квантовую химию: учеб. пособие / А.Б. Трофимов.– Иркутск: Изд-во ИГУ, 2013.– 192 с.+
9. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. Учеб. пособие. / В.Г.Цирельсон.–М.:БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012.– 495 с. Режим доступа ЭБС издательства «Лань».+
10. Витковская Н.М Основы теории групп и ее химические приложения: учеб. пособие / Н.М. Витковская, В.Б. Кобычев. – Иркутск :ООО «Изд-во Аспринт», 2014 . – 108 с.+



д) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

1. <http://webbook.nist.gov/chemistry> –
База данных Национального бюро стандартов США, содержит ряд экспериментальных и расчетных данных о молекулах в газовой фазе.

Следующие БД доступны непосредственно из ChemSketch:

2. <http://www.chemspider.com> –
база данных химических соединений и смесей, принадлежащая королевскому химическому обществу Великобритании;
3. <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov> –
база данных химических соединений и смесей, являющаяся общественным достоянием. Обслуживается Национальным центром биотехнологической информации США (NCBI);
4. <http://www.emolecules.com> –
база данных поставщиков химических веществ, и биохимических препаратов.

VI. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1. Учебно-лабораторное оборудование:

Помещения для проведения лекционных и практических занятий, укомплектованные необходимым оборудованием, а именно:

- аудитории, оснащенные мультимедийными средствами, для проведения аудиторных и практических занятий ауд. 5, 402, 426 оборудованы мультимедийными проекторами (InFocus IN 105 (3D Ready), настенными экранами, ноутбуками Samsung NP 300T5A-A0FRU.
- компьютерный класс химического факультета (ауд. 209) оборудован 12 ПК с установленным пакетом MS Office. Имеется локальная сеть.

6.2. Программное обеспечение:

Лицензируемое ПО:

- Операционная система Windows-10, лицензия принадлежит ИГУ;
- Пакет MS Office – 2016, лицензия принадлежит ИГУ;

Свободно распространяемые программы:

- ChemSketch и сопутствующие программы пакета ACDLABS 12.0 (3D-Viewer, ACD Free Name, средства доступа к БД);
- Firefly – программа неэмпирических расчетов [Alex A. Granovsky, Firefly version 8, [www http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html](http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html)];
- Molecular Modeling and Simulation Kit (MaSK) для визуализации результатов расчетов Firefly, наглядного представления строения молекул и вида МО;
- KINET – программа для численного моделирования кинетики сложных химических реакций [А.В. Абраменков, <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/KINET2012>].

6.3. Технические и электронные средства:

Все читаемые лекции сопровождаются презентациями, доступными для студентов в системе ЭИОС ИГУ. Там же находятся все практические задания.

VII. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В процессе изучения дисциплины используются как традиционные, так и инновационные технологии, активные и интерактивные методы и формы обучения. При прохождении дисциплины «Компьютерные технологии в науке» предусмотрены

- 1) лабораторные занятия, во время которых студентами индивидуально выполняются практические работы, позволяющие приобрести навыки поиска и обработки информации, составления сложных документов с элементами деловой и иллюстративной графики, а также проведения кинетических и квантовохимических расчетов.
- 2) самостоятельная работа студентов, включающая подготовку к лабораторным занятиям в форме изучения теоретического материала, выполнения отчета по лабораторным работам, а также выполнения итоговой работы в составе группы;
- 3) консультирование студентов по изучаемым теоретическим и практическим вопросам.

Активные формы обучения. На практических занятиях способствует приобретению навыков самостоятельной подготовки документов, практического использования стандартного ПО, включая популярные химически-ориентированные пакеты.

Закрепление теоретического читаемого курса проводится в виде интерактивного обучения – коллоквиумов, и выполнения расчетных задач.

Наименование тем занятий с использованием активных форм обучения:

	Тема занятия	Вид занятия	Форма / Методы интерактивного обучения	Кол-во часов
1	Организация реляционной базы данных средствами ACCESS	практич.	групповая дискуссия	2
2	Редакторы химических формул	практич	групповая дискуссия	2
3	Расчеты равновесной геометрии молекул средствами программы FIREFLY	практич	групповая дискуссия	2
4	Расчет индексов реакционной способности средствами программы FIREFLY	практич	групповая дискуссия	2
5	Моделирование кинетики реакций средствами программы KINET	практич	групповая дискуссия	2
6	Защита информации	практич	групповая дискуссия	2
Итого часов				12

VIII. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

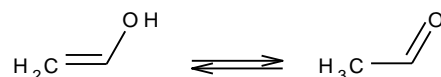
Материалы для проведения текущего и промежуточного контроля знаний студентов:

№ п\п	Вид контроля	Контролируемые темы (разделы)	Компетенции, компоненты которых контролируются
	Выполнение практических работ с использованием ChemSketch	Представление химической информации Базы данных Представление результатов исследований	ОПК-1.2 ОПК-3.2
	Выполнение ПР по обработке баз данных	Базы данных	ОПК-1.2 ОПК-3.2
	Выполнение ПР по проведению квантовохимических рвсчетов	Методы квантовой химии	ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.2 ОПК-3.3
	ПР по моделированию кинетики сложных реакций	Моделирование кинетики сложных реакций	ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.2 ОПК-3.3
	Создание презентации по теме «Информационная безопасность»	Представление результатов исследований Защита информации	ОПК-1.2 ОПК-3.2
	Выполнение итоговой работы в составе группы		ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.2 ОПК-3.3
	Зачет		

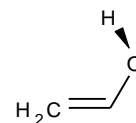
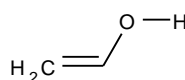
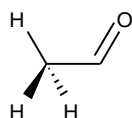
Промежуточная аттестация (зачет) проводится в форме устного собеседования по выполненной итоговой практической работе, которая выполняется группой студентов в составе 2 или 3 человек и должна быть представлена в форме научного отчета и/или презентации научного доклада.

Демонстрационный вариант итоговой контрольной работы

- Используя данные Sample1500.xls, найдите общее число проб, отобранных в Иркутском районе за три летних месяца. Каких проб отобрано больше: на свинец или на ртуть? Какие пробы отбирались наиболее часто?
- Исследуйте кето-енольную таутомерию



в молекуле винилового спирта в рамках метода MP2/6-31G*. Для обоих таутомеров найдите наиболее устойчивые конформации. Рассмотрите все возможные варианты, например:



Оцените соотношение кетонной и енольной форм в равновесной смеси при комнатной температуре (300 К) по формуле

$$\Delta E = -RT \ln K,$$

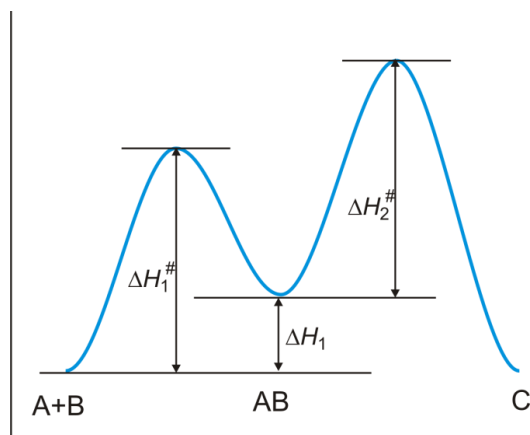
где K – константа равновесия, $R = 8,316382$ Дж/моль·К.

- Составьте отчет с указанием энергий всех рассмотренных структур, используйте ChemSketch для их изображения:

Таблица. Энергии рассмотренных структур

Структура	E_{MP2} , а.е.	ZPE, а.е.	Еотн., ккал/моль	Природа точки
	-153.346919	0.056957	0,00	минимум

- Постройте модель реакции $A + B \rightleftharpoons AB \rightarrow C$, для которой $\Delta H_1^\ddagger = 15$ ккал/моль, $\Delta H_2^\ddagger = 15$ ккал/моль, $\Delta H_1 = 5$ ккал/моль. Исследуйте поведение реакционной системы на протяжении часа при $t = 25^\circ\text{C}$, $t = 50^\circ\text{C}$ и $t = 100^\circ\text{C}$.



Примерный список вопросов к зачету:

1. Структурирование данных. Табличное представление БД. Поля и записи. Реляционные БД. Отношения между таблицами. Сортировка записей в БД; старшинство ключей сортировки. Фильтрация данных. Запросы на выборку, запросы на модификацию. Формы. Отчеты.
2. Обработка списков в Excel. Фильтрация данных. Автофильтр. Задание условий фильтрации данных с использованием логической операции И (ИЛИ). Расширенный фильтр. Критерии. Анализ списка с помощью подведения промежуточных итогов. Сводные таблицы и сводные диаграммы.
3. Специфика представления химической информации. Одномерные схемы нотации (номенклатура IUPAC, SMILES, InChI). Открытые и коммерческие базы данных по химии. Генерирование InChI кодов и поиск в базах данных сети Интернет.
4. Статистическая обработка результатов измерений и принципы проверки научных гипотез и математических моделей. Средства Microsoft Excel для статистического анализа данных. Встроенные статистические функции Excel. Аппроксимация экспериментальных зависимостей аналитическими формулами. Построение линии тренда. Оценка надежности аппроксимации. Множественная линейная регрессия. Надстройка «Поиск решения». Надстройка «Пакет анализа».
5. Общая характеристика методов квантовой химии. Интерфейс программы FireFly. Оптимизация геометрии, расчет колебательных спектров. Расчет термодинамических поправок, оценка теплового эффекта реакции, оценка соотношения изомеров в равновесной смеси. Влияние базисного набора и уровня учета корреляционных эффектов.
Поиск переходных состояний. Оценка активационного барьера реакции. Учет влияния растворителя.
Связь электронного строения молекул с их реакционной способностью. Индексы реакционной способности. Заряды на атомах, порядки связей и электростатический потенциал. Граничные орбитали.
Описание систем с открытыми оболочками. Возбужденные состояния молекул. Метод конфигурационного взаимодействия. Расчет фотоэлектронных спектров.
6. Моделирование кинетики сложных реакций.
Возможности программы KINET для решения прямой задачи химической кинетики. Ввод кинетической схемы (механизма) реакции. Задание констант скорости. Модификация уравнений математической модели. Задание условий реакции и режима вывода результатов.
Возможности программы KINET для решения обратной задачи химической кинетики.
7. Подготовка результатов исследования для представления научной общественности.
Редактор химических формул ChemSketch. Построение и визуализация пространственной структуры молекул. Использование стилей.
Визуализация результатов квантовохимических расчетов с помощью программы MASK.
Создание презентаций средствами PowerPoint.

8. Защита информации. Представления о защите информации и информационной безопасности. Защита информации в локальных компьютерных сетях, антивирусная защита.

Разработчики:


(подпись)

профессор
(занимаемая должность)

В.Б. Кобычев
(инициалы, фамилия)

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учетом рекомендаций ПООП по направлению и профилю подготовки 04.04.01 «Химия».

Программа рассмотрена на заседании кафедры физической и коллоидной химии «26» мая 2022 г.

Протокол № 7

И. о. зав. кафедрой



/Л.Б. Белых/

Настоящая программа, не может быть воспроизведена ни в какой форме без предварительного письменного разрешения кафедры-разработчика программы.