



**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ФГБОУ ВО «ИГУ»

Кафедра общей и неорганической химии

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,



А.И. Вильмс
15.04.2022 г.

Рабочая программа дисциплины ФТД.03

Наименование дисциплины: **Компьютерное моделирование молекулярных систем: от
схемы до механизма реакции**

Рекомендуется для направления подготовки: **04.03.01 «Химия»**

Направленность **Химия.**

Степень (квалификация) выпускника: **Бакалавр**

Согласовано с УМК химического
факультета

Протокол №4 от 15.04.2022 г.

Председатель  А.И. Вильмс

Рекомендовано кафедрой

кафедры теоретической и прикладной
органической химии и полимеризационных
процессов

Протокол №_5 от 14.04.2022 г.

Зав. кафедрой,

Кижняев В.Н.



Иркутск 2022 г.

Содержание

	стр.
I. Цели и задачи дисциплины	3
II. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО	3
III. Требования к результатам освоения дисциплины	4
IV. Содержание и структура дисциплины	5
4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам	5
4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	6
4.3 Содержание учебного материала	7
4.3.1 Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ	7
4.3.2 Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение самостоятельной работы студентов	8
4.3.3 Методические указания по организации самостоятельной работы студентов	8
4.4 Примерная тематика курсовых работ (проектов) (при наличии)	8
V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины:	8
а) основная литература;	8
б) дополнительная литература;	9
в) периодические издания;	9
г) список авторских методических разработок;	9
д) базы данных, поисково-справочные и информационные системы	9
VI. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)	9
6.1 Учебно-лабораторное оборудование	9
6.2 Программное обеспечение	10
6.3 Технические и электронные средства	10
VII. Образовательные технологии	10
VIII. Оценочные средства (ОС)	10

I. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели: формирование базовых навыков компьютерного моделирования молекулярных систем и химических реакций.

Задачи:

1. дать представление о современных квантовохимических подходах к изучению свойств молекул и моделированию механизмов реакций;
2. научить студентов выполнять основные виды квантовохимических расчетов молекулярных систем с использованием программных пакетов для квантовохимических расчетов;
3. сформировать умение применять на практике полученные знания.

II. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

2.1. Учебная дисциплина «Компьютерное моделирование молекулярных систем: от схемы до механизма реакции» относится к факультативной дисциплинам по выбору вариативной части учебного плана подготовки бакалавров по направлению 04.03.01 - Химия (ФТД.03).

2.2. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими дисциплинами, а именно:

«Математика» (Б1.О.10),
«Общая химия. Химия неметаллов» (Б1.О.16),
«Органическая химия» (Б1.О.20),
«Информатика» (Б1.О.22),
«Информатика и вычислительная техника» (Б1.О.23),
«Физическая химия. Химическая термодинамика» (Б1.О.24),
«Физическая химия. Электрохимия. Химическая кинетика и катализ» (Б1.О.25),
«Квантовая механика» (Б1.О.30),
«Математическая теория эксперимента» (Б1.В.02).
«Надежность современных методов вычислительной химии» (ФТД.02)

2.3 Перечень последующих учебных дисциплин программы бакалавриата по направлению 04.03.01, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной:

«Преддипломная практика» (Б2.О.01(Пд)),
«Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы» (Б3.01(Д)),

и магистратуры по направлению 04.04.01:

«Квантовая химия» (Б1.О.04),
«Информационные технологии в химических исследованиях» (Б1.В.08),
«Компьютерные технологии в науке» (Б1.О.05),
«Преддипломная практика» (Б2.О.01(Пд)),
«Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы» (Б3.01(Д)).

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 04.03.01 «Химия», профиль: Химия.

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

Компетенция	Индикаторы компетенций	Результаты обучения
ПК-6 Способен применять основные естественно-научные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	ИДК_{ПК6.1} Знает теоретические основы базовых химических дисциплин (неорганической, органической, аналитической, физической химии) и способы их использования при решении конкретных химических задач	Знать: основные методы компьютерного моделирования химических процессов, типы стационарных точек на поверхности потенциальной энергии и способы их идентификации, квантовохимические концепции реакционной способности; Уметь: выполнять основные виды квантовохимических расчетов электронного строения молекул, а также переходных состояний химических реакций, проводить анализ реакционной способности соединений с применением различных индексов реакционной способности; Владеть: методологией основных видов квантовохимических расчетов молекулярных систем и навыками оценки реакционной способности на основе результатов квантовохимических расчетов.

IV. СОДЕРЖАНИЕ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Трудоемкость дисциплины составляет 1 зачетную единицу, 36 часов.

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)	КСР + консультации + КО		
1	Введение. Основные этапы выполнения квантовохимических расчётов.	6	2	2	2	2	Устный опрос, практическое задание
2	Поверхность потенциальной энергии. Реакционная способность молекул.	6	2	2	2	2	Устный опрос, практическое задание
3	Расчёт термодинамических характеристик химических реакций.	6	2	3	3	2	Устный опрос, практическое задание
4	Моделирование механизма химической реакции. Поиск переходных состояний.	6	2	3	3	2	Устный опрос, практическое задание
Итого часов			8	10	10	8	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.)		
6	Введение. Основные этапы выполнения квантовохимических расчётов.	Поиск и анализ литературы о программных пакетах, позволяющих обрабатывать и визуализировать результаты расчётов. Составление входных заданий для ПО Firefly.		2	устный опрос	см. список рекомендуемой литературы
6	Поверхность потенциальной энергии. Реакционная способность молекул.	Поиск и анализ литературы о квантовохимических методах оценки реакционной способности соединений, изучаемых в рамках НИР или ВКР		2	устный опрос	см. список рекомендуемой литературы
6	Расчёт термодинамических характеристик химических реакций.	Поиск и анализ литературы о квантовохимических методах оценки термодинамических характеристик химических реакций, изучаемых в рамках НИР или ВКР		2	устный опрос	см. список рекомендуемой литературы
6	Моделирование механизма химической реакции. Поиск переходных состояний.	Поиск и анализ литературы о квантовохимических методах оценки кинетических характеристик химических реакций, изучаемых в рамках НИР или ВКР		2	устный опрос	см. список рекомендуемой литературы
Общая трудоемкость самостоятельной работы по дисциплине (час)				8		
Бюджет времени самостоятельной работы, предусмотренный учебным планом для данной дисциплины (час)				8		

Контактная работа может быть аудиторной, внеаудиторной, а также проводиться в электронной информационно-образовательной среде.

Контактная работа при проведении учебных занятий по дисциплинам (модулям) включает в себя:

занятия лекционного типа (лекции и иные учебные занятия, предусматривающие преимущественную передачу учебной информации педагогическими работниками организации и (или) лицами, привлекаемыми организацией к реализации образовательных программ на иных условиях, обучающимся),

занятия семинарского типа (семинары, практические занятия, практикумы, лабораторные работы, коллоквиумы и иные аналогичные занятия),

групповые консультации,

индивидуальную работу обучающихся с педагогическими работниками организации и (или) лицами, привлекаемыми организацией к реализации образовательных программ на иных условиях (в том числе индивидуальные консультации);

иную контактную работу (при необходимости), предусматривающую групповую или индивидуальную работу обучающихся с педагогическими работниками организации и (или) лицами, привлекаемыми организацией к реализации образовательных программ на иных условиях, определяемую организацией самостоятельно.

4.3 Содержание учебного материала

Содержание разделов и тем дисциплины

1. Введение. Основные этапы выполнения квантовохимических расчётов.

Роль и место квантовохимических исследований в современной науке. Подготовка входного задания к программным пакетам для проведения квантовохимических расчетов. Ключевые слова, управляющие работой программы для квантовохимических расчетов (задание метода расчета и базисного набора, вычисление энергии, оптимизация геометрии, расчет зарядов на атомах, спектров, учет влияния растворителя). Анализ результатов расчетов. Структура текстовых output-файлов.

2. Поверхность потенциальной энергии. Реакционная способность молекул.

Поверхность потенциальной энергии (ППЭ). Энергия нулевых колебаний (ZPVE). Энергия связи. Оптимизация геометрии. Точки минимума и седловые точки. Частоты нормальных колебаний. Идентификация стационарной точки. Расчеты зарядов на атомах в молекуле. Расчеты молекулярных электростатических потенциалов. Расчеты энергий молекулярных орбиталей. Индексы реакционной способности.

3. Расчёт термодинамических характеристик химических реакций.

Принципы расчета термодинамических характеристик методами квантовой химии. Сродство к электрону. Потенциал ионизации. Кислотность и основность в газовой фазе. Расчеты тепловых эффектов химических реакций. Расчеты энтальпии образования вещества.

4. Моделирование механизма химической реакции. Поиск переходных состояний.

Моделирование активированных комплексов химических процессов. Поиск седловых точек на ППЭ (сканирование ППЭ, алгоритм Берни, QST2, QST3). Спуск по координате реакции. Расчет энергий активации и кинетических параметров химических реакций.

4.3.1. Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ

п/п	№ раздела и темы дисциплины	Наименование семинаров, практических и лабораторных работ	Трудоемкость (час.)	Из них практическая подготовка	Оценочные средства	Формируемые компетенции
1	2	3	4	5	6	7
1.	1	Введение. Основные этапы выполнения квантовохимических расчётов.	2	2	устный опрос	ПК-6.1
2.	2	Поверхность потенциальной энергии. Реакционная способность молекул.	2	2	устный опрос	ПК-6.1
3.	3	Расчёт термодинамических характеристик химических реакций.	3	3	устный опрос	ПК-6.1
4.	4	Моделирование механизма химической реакции. Поиск переходных состояний.	3	3	устный опрос	ПК-6.1

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

№ п/п	Тема	Задание	Формируемая компетенция	ИДК
1	1	Поиск и анализ литературы о программных пакетах, позволяющих обрабатывать и визуализировать результаты расчётов. Составление входных заданий для ПО Firefly.	ПК-6	<i>ИДК ПК-6.1</i>
2	2	Поиск и анализ литературы о квантовохимических методах оценки реакционной способности соединений, изучаемых в рамках НИР или ВКР	ПК-6	<i>ИДК ПК-6.1</i>
3	3	Поиск и анализ литературы о квантовохимических методах оценки термодинамических характеристик химических реакций, изучаемых в рамках НИР или ВКР	ПК-6	<i>ИДК ПК-6.1</i>
4	4	Поиск и анализ литературы о квантовохимических методах оценки кинетических характеристик химических реакций, изучаемых в рамках НИР или ВКР	ПК-6	<i>ИДК ПК-6.1</i>

4.3.3. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа студентов, связанная с закреплением теоретического материала в виде составления входных заданий для ПО Firefly, поиска и анализа литературных данных о программных пакетах, позволяющих обрабатывать и визуализировать результаты расчётов, а также методах оценки реакционной способности соединений, термодинамических и кинетических характеристик химических реакций для изучаемой в рамках своей научной работы молекулярной системы (систем) проводится во внеаудиторное время.

В ходе подготовки рекомендуется:

- Повторить лекционный материал.
- При необходимости обратиться к рекомендованной учебной литературе.
- Проработать задания, решаемые на практических занятиях.
- При необходимости обратиться за консультацией к преподавателю.

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

Выполнение курсовых работ не планируется

V. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

а) основная литература

1. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия: Учеб. пособие / В.И. Барановский. - М.: Академия, 2008. – 383 с.

2. Трофимов А.Б. Введение в квантовую химию: учеб. пособие / А. Б. Трофимов; – Иркутск: Изд-во ИГУ, 2013. - 192 с.;
3. Кобычев В.Б. Квантовая механика для химиков. Конспекты лекций. Часть I. / В. Б. Кобычев, А. Б. Трофимов, Н. М. Витковская. – Иркутск: Издательство ООО «Издательство «Аспринт», 2015. – 120 с.
4. Кобычев В.Б. Квантовая механика для химиков. Конспекты лекций. Часть II. / В. Б. Кобычев, А. Б. Трофимов, Н. М. Витковская. – Иркутск: Издательство ООО «Издательство «Аспринт», 2018. – 124 с.
5. 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».

б) дополнительная литература

6. Майер И. Избранные главы квантовой химии / И. Майер; пер. с англ.– М.: Бином, Лаборатория знаний, 2014.– 384 с. Режим доступа ЭБС издательства «Лань».
7. Барановский В.И. Квантовохимические расчеты повышенной точности. Учебное пособие, 2015. – 89 с.



в) периодические издания (при необходимости)

8. Narbe Mardirossian & Martin Head-Gordon (2017) Thirty years of density functional theory in computational chemistry: an overview and extensive assessment of 200 density functionals, Molecular Physics, 115:19, 2315-2372, DOI: 10.1080/00268976.2017.1333644.
9. Bursch, M.; Mewes, J.; Hansen, A.; Grimme, S. Best Practice DFT Protocols for Basic Molecular Computational Chemistry**. Angew. Chemie Int. Ed. 2022, 61 (42). <https://doi.org/10.1002/anie.202205735>.

г) список авторских методических разработок:

д) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

10. <http://www.qchem.ru/lectures/>
Курс лекций по квантовой механике и квантовой химии, подготовленный д.х.н., проф. С.Л. Хурсаном (БашГУ)
11. <http://bd.viniti.ru/>
База данных ВИНТИ РАН
12. <http://webbook.nist.gov/chemistry>
База данных NIST Chemistry WebBook
13. <https://www.elibrary.ru>
Научная электронная библиотека eLIBRARY

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. 335) оборудован 11 ПК с установленным пакетом MS Office. Имеется локальная сеть.

6.2. Программное обеспечение:

Лицензируемое ПО:

- MS Excel в составе MS Office - 2016

Свободно распространяемые программы:

- 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.

6.3. Технические и электронные средства:

Методической концепцией преподавания предусмотрено использование технических и электронных средств обучения студентов: мультимедийные презентации

VII. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В процессе изучения дисциплины «Компьютерное моделирование молекулярных систем: от схемы до механизма реакции» используются как традиционные, так и инновационные технологии, активные и интерактивные методы и формы обучения: объяснительно-иллюстративный метод с элементами проблемного изложения, технология профессионально-ориентированного обучения, лекции, самостоятельные работы, разбор конкретных ситуаций.

VIII. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Оценочные средства (ОС):

Оценочные средства текущего контроля формируются в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе университета. Назначение оценочных средств текущего контроля - выявить у обучающихся сформированность компетенций: ПК-6.

Материалы для проведения текущего и промежуточного контроля знаний студентов:

№	Вид контроля	Контролируемые темы (разделы)	Компетенции, компоненты которых контролируются
1	Участие в дискуссиях на семинарском занятии	Основные этапы выполнения квантовохимических расчётов.	ПК-6.
2	Участие в дискуссиях на семинарском занятии	Поверхность потенциальной энергии. Реакционная способность молекул.	ПК-6.
3	Участие в дискуссиях на семинарском занятии	Расчёт термодинамических характеристик химических реакций.	ПК-6.
4	Участие в дискуссиях на семинарском занятии	Моделирование механизма химической реакции. Поиск переходных состояний.	ПК-6.

ВОПРОСЫ ДЛЯ СОБЕСЕДОВАНИЯ

Семинар №1. Основные этапы выполнения квантовохимических расчётов.

1. Роль и место квантовохимических исследований в современной науке.
2. Подготовка входного задания к программным пакетам для проведения квантовохимических расчетов.
3. Ключевые слова, управляющие работой программы для квантово-химических расчетов (задание метода расчета и базисного набора, вычисление энергии, оптимизация геометрии, расчет зарядов на атомах, спектров, учет влияния растворителя).
4. Анализ результатов расчетов. Структура текстовых output-файлов.

Семинар №2. Поверхность потенциальной энергии. Реакционная способность молекул.

1. Поверхность потенциальной энергии (ППЭ). Энергия нулевых колебаний (ZPVE). Энергия связи.
2. Оптимизация геометрии. Точки минимума и седловые точки. Частоты нормальных колебаний. Идентификация стационарной точки.
3. Расчеты зарядов на атомах в молекуле.
4. Расчеты молекулярных электростатических потенциалов.
5. Расчеты энергий молекулярных орбиталей.
6. Индексы реакционной способности.

Семинар №3. Расчёт термодинамических характеристик химических реакций.

1. Принципы расчета термодинамических характеристик методами квантовой химии.
2. Сродство к электрону. Потенциал ионизации.
3. Кислотность и основность в газовой фазе.
4. Расчеты тепловых эффектов химических реакций. Расчеты энтальпии образования вещества.

Семинар №4. Моделирование механизма химической реакции. Поиск переходных состояний.

1. Моделирование активированных комплексов химических процессов.
2. Поиск седловых точек на ППЭ (сканирование ППЭ, алгоритм Берни, QST2, QST3).
3. Спуск по координате реакции.
4. Расчет энергий активации и кинетических параметров химических реакций.

Промежуточная аттестация (*зачет*) проводится с использованием балльно-рейтинговой системы оценивания результатов обучения.

ПРИМЕРНЫЙ ПЕРЕЧЕНЬ ВОПРОСОВ И ЗАДАНИЙ К ЗАЧЕТУ

1. Роль и место квантовохимических исследований в современной науке.
2. Подготовка входного задания к программным пакетам для проведения квантовохимических расчетов.
3. Ключевые слова, управляющие работой программы для квантово-химических расчетов (задание метода расчета и базисного набора, вычисление энергии, оптимизация геометрии, расчет зарядов на атомах, спектров, учет влияния растворителя).
4. Анализ результатов расчетов. Структура текстовых output-файлов.
5. Поверхность потенциальной энергии (ППЭ). Энергия нулевых колебаний (ZPVE). Энергия связи.
6. Оптимизация геометрии. Точки минимума и седловые точки. Частоты нормальных колебаний. Идентификация стационарной точки.
7. Расчеты зарядов на атомах в молекуле.
8. Расчеты молекулярных электростатических потенциалов.
9. Расчеты энергий молекулярных орбиталей.
10. Индексы реакционной способности.
11. Принципы расчета термодинамических характеристик методами квантовой химии.
12. Сродство к электрону. Потенциал ионизации.
13. Кислотность и основность в газовой фазе.
14. Расчеты тепловых эффектов химических реакций. Расчеты энтальпии образования вещества.
15. Моделирование активированных комплексов химических процессов.
16. Поиск седловых точек на ППЭ (сканирование ППЭ, алгоритм Берни, QST2, QST3).
17. Спуск по координате реакции.
18. Расчет энергий активации и кинетических параметров химических реакций.

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИЙ

Индикаторы достижения компетенции	Результаты обучения (знать, уметь, владеть)	Процедура оценивания
<i>ИДКПК6.1</i> Знает теоретические основы базовых химических дисциплин (неорганической, органической, аналитической, физической химии) и способы их использования при решении конкретных химических задач	Знает: основные методы компьютерного моделирования химических процессов, типы стационарных точек на поверхности потенциальной энергии и способы их идентификации, квантовохимические концепции реакционной способности.	Выполнение практических заданий, работа на семинарах.
	Умеет: выполнять основные виды квантовохимических расчетов электронного строения молекул, а также переходных состояний химических реакций, проводить анализ реакционной способности соединений с применением различных индексов реакционной способности.	
	Владеет: методологией основных видов квантовохимических расчетов молекулярных систем и навыками оценки реакционной способности на основе результатов квантовохимических расчетов.	

Программа оценивания контролируемых компетенций:

Тема или раздел дисциплины ¹	Код индикатора компетенции	Планируемый результат	Показатель	Критерий оценивания	Наименование ОС ²	
					ТК ³	ПА ⁴
Основные этапы выполнения квантово-химических расчётов.	ИДКпк-6.1 Знает теоретические основы базовых химических дисциплин (неорганической, органической, аналитической, физической химии) и способы их использования	Знать: основные этапы выполнения квантово-химических расчётов. Уметь: подготавливать входное задание для проведения квантово-химических расчётов Владеть: навыками создания входных заданий и запуска квантовохимических расчётов	Знает: способы задания координат молекул, ключевые слова, управляющие работой программ. Умеет: строить координаты молекулы, создавать входное задание для программ Владет: навыками проведения квантовохимических расчётов	Владеет материалом, представленным в разделе «Вопросы для собеседования», семинар 1, № 1-4. Активно отвечал на семинарах. Выполнил 2/3 самостоятельной работы.	УО, ПЗ	Зачет
Поверхность потенциальной энергии. Реакционная способность молекул.	при решении конкретных химических задач	Знать: понятие поверхности потенциальной энергии и стационарных точек, способы расчётов характеристик реакционной способности молекул Уметь: идентифицировать стационарные точки, рассчитывать характеристики реакционной способности молекул	Знает: подходы для расчётов зарядов на атомах, энергий молекулярных орбиталей, молекулярных электростатических потенциалов, индексов реакционной способности. Умеет: проводить оптимизацию геометрии молекул, рассчитывать заряды на атомах, энергии молекулярных орбиталей, молекулярные электростатические потенциалы, индексы реакционной способности. Владет: навыками анализа результатов расчёта зарядов на	Владеет материалом, представленным в разделе «Вопросы для собеседования», семинар 2, № 1-6. Активно отвечал на семинарах. Выполнил 2/3 самостоятельной работы.	УО, ПЗ	

		Владеть: навыками проведения квантовохимических расчётов характеристик реакционной способности молекул	атомах, энергий молекулярных орбиталей, молекулярных электростатических потенциалов, индексов реакционной способности.			
Расчёт термодинамических характеристик химических реакций.		Знать: Принципы расчета термодинамических характеристик методами квантовой химии Уметь: рассчитывать термодинамические характеристики молекул и химических реакций методами квантовой химии Владеть: навыками проведения квантовохимических расчётов термодинамических характеристик молекул и химических реакций	Знает: подходы для расчётов сродства к электрону, потенциала ионизации, кислотности и основности в газовой фазе, тепловых эффектов химических реакций и энтальпии образования вещества Умеет: рассчитывать сродство к электрону, потенциал ионизации, кислотность и основность в газовой фазе, тепловые эффекты химических реакций и энтальпию образования вещества Владеет: навыками анализа результатов расчёта сродства к электрону, потенциала ионизации, кислотности и основности в газовой фазе, тепловых эффектов химических реакций и энтальпии образования вещества.	Владеет материалом, представленным в разделе «Вопросы для собеседования», семинар 3, № 1-4. Активно отвечал на семинарах. Выполнил 2/3 самостоятельной работы.	УО, ПЗ	
Моделирование механизма химической реакции. Поиск переходных состояний.		Знать: Принципы расчета энергий активации и кинетических параметров химических реакций методами квантовой химии Уметь: рассчитывать энергии активации и	Знает: подходы поиска седловых точек на ППЭ и спуска по координате реакции Умеет: находить и идентифицировать переходные состояния, рассчитывать энергии активации и кинетические характеристики химических	Владеет материалом, представленным в разделе «Вопросы для собеседования», семинар 4, № 1-4. Активно отвечал	УО, ПЗ	

		кинетические параметры химических реакций методами квантовой химии Владеть: навыками проведения квантовохимических расчётов энергий активации и кинетических параметров химических реакций	реакций Владеет: навыками анализа результатов расчёта переходных состояний при помощи алгоритма Берни, методов QST2 и QST3	на семинарах. Выполнил 2/3 самостоятельной работы.		
--	--	--	--	---	--	--

УО – устный опрос, ПЗ – практическое задание.

КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ:

а) промежуточная аттестация - зачет

В соответствии с балльно-рейтинговой системой ИГУ для получения зачета по дисциплине «Компьютерное моделирование молекулярных систем: от схемы до механизма

реакции» студенту необходимо набрать не менее 60 баллов.

1. Обязательным условием является выполнение студентом 4 практических заданий по данной дисциплине.
2. Отчет по каждой практической работе оценивается в 25 баллов. Оценивается полнота и правильность выполненного задания, а также сроки предоставления.

Разработчик:

к.х.н., доцент кафедры А.С. Бобков



Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учетом рекомендаций ПООП по направлению и профилю подготовки 04.03.01 – «Химия».

Программа рассмотрена на заседании кафедры теоретической и прикладной органической химии и полимеризационных процессов .

Протокол № 5 от 14.04. 2022 г.

зав. кафедрой Кижняев В.Н.



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