

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Смирнов Сергей Николаевич

Должность: врио ректора

Дата подписания: 02.10.2024 09:09:30

Уникальный программный ключ:

69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»



Утверждаю:

руководитель ООП

 Никольский В.М.

27 мая 2024 г.

Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)  
Физико-химические методы исследования

Направление подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль)

Аналитическая химия

Для студентов 1 курса очной формы обучения

Составитель: д.х.н., профессор Алексеев В.Г.

Тверь, 2023



## **I. Аннотация**

### **1. Цель и задачи дисциплины**

Целью освоения дисциплины является: освоение современных расчетных физико-химических методов исследования.

Задачами освоения дисциплины являются:

- изучение теоретических основ современных методов компьютерного моделирования свойств молекул и молекулярных систем;
- освоение работы с необходимым программным обеспечением.

### **2. Место дисциплины в структуре ООП**

Дисциплина «Физико-химические методы исследования» входит в обязательную часть Блока 1. «Дисциплины» учебного плана. Она непосредственно связана с дисциплинами «Актуальные задачи современной химии. Часть 1», «Современные инструментальные методы анализа», «Нанохимия», «Химия координационных соединений». Дисциплина закладывает знания для выполнения научно-исследовательской работы и прохождения научно-исследовательской практики.

**3. Объем дисциплины: 3 зачетных единицы, 108 академических часов, в том числе:**

**контактная аудиторная работа:** лекции - 15 часов, лабораторные работы - 15 часов, в т.ч. лабораторная практическая подготовка - 15 часов;  
**самостоятельная работа: 78 часов.**

**4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы**

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ОПК-1 Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов,	ОПК-1.2. Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук

программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	
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

**5. Форма промежуточной аттестации и семестр прохождения:**

зачет во 2-м семестре.

**6. Язык преподавания: русский.**

**II. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий**

Учебная программа – наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)		Самостоятельная работа, в том числе контроль (час.)
		Лекции	Лабораторные работы	
<i>Раздел 1. Построение компьютерных моделей молекул и молекулярных систем</i>				
Тема 1. Работа с программой Chem Office	7	1	1	5
Тема 2. Работа с программами Spartan, Maestro, Gauss View	8	1	1	6
<i>Раздел 2. Метод молекулярной механики</i>				
Тема 3. Принципы и возможности метода. Силовые поля.	7	1	1	5
Тема 4. Работа с программами Chem Office, Spartan, Macro Model	8	1	1	6
<i>Раздел 3. Метод молекулярной динамики</i>				
Тема 5. Принципы и возможности метода.	7	1	1	5
Тема 6. Работа с программой Chem Office	7	1	1	5
<i>Раздел 4. Метод полуэмпирической квантовой механики</i>				
Тема 7. Принципы и возможности метода. Параметрические модели.	7	1	1	5
Тема 8. Работа с программами GAMESS и МОРАС с использованием интерфейса Chem Office	8	1	1	6
Тема 9. Работа с программами Spartan и Maestro	7	1	1	5

<i>Раздел 5. Методы неэмпирической квантовой механики.</i>				
Тема 10. Методы HF, DFT и MP2. Принципы и возможности.	7	1	1	5
Тема 11. Наборы базисных функций.	7	1	1	5
Тема 12. Работа с программами GAMESS и Gaussian с использованием интерфейса Chem Office	7	1	1	5
Тема 13. Работа с программой Gaussian с использованием интерфейса Gauss View	7	1	1	5
Тема 14. Работа с программой Spartan	7	1	1	5
Тема 15. Работа с программой Jaguar с использованием интерфейса Maestro	7	1	1	5
<b>ИТОГО</b>	<b>108</b>	<b>15</b>	<b>15</b>	<b>78</b>

### III. Образовательные технологии

Учебная программа – наименование разделов и тем (в строгом соответствии с разделом II РПД)	Вид занятия	Образовательные технологии
<i>Раздел 1. Построение компьютерных моделей молекул и молекулярных систем</i>		
Тема 1. Работа с программой Chem Office		
Тема 2. Работа с программами Spartan, Maestro, Gauss View		
<i>Раздел 2. Метод молекулярной механики</i>		
Тема 3. Принципы и возможности метода. Силовые поля.		
Тема 4. Работа с программами Chem Office, Spartan, Macro Model		
<i>Раздел 3. Метод молекулярной динамики</i>		
Тема 5. Принципы и возможности метода.		
Тема 6. Работа с программой Chem Office		
<i>Раздел 4. Метод полуэмпирической квантовой механики</i>		
Тема 7. Принципы и возможности метода. Параметрические модели.		
Тема 8. Работа с программами GAMESS и МОРАС с использованием интерфейса Chem Office		
Тема 9. Работа с программами Spartan и Maestro		
<i>Раздел 5. Методы неэмпирической квантовой механики.</i>		
Тема 10. Методы HF, DFT и MP2. Принципы и возможности.		
Тема 11. Наборы базисных функций.		
Тема 12. Работа с программами GAMESS и Gaussian с использованием интерфейса Chem Office		
Тема 13. Работа с программой Gaussian с использованием интерфейса Gauss View		
Тема 14. Работа с программой Spartan		

Тема 15. Работа с программой Jaguar с использованием интерфейса Maestro		
---	--	--

#### IV. Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации

##### 1. Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции М-ОПК-1.2. Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук

Этап формирования компетенции, в котором участвует дисциплина	Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков (2-3 примера)	Показатели и критерии оценивания компетенции, шкала оценивания
<b>Владеть:</b> навыками работы с программами, обеспечивающими реализацию методов молекулярной механики, молекулярной динамики и квантовой химии.	<p><b>Задание 1.</b> С использованием программы Spartan создать компьютерную модель молекулы тетраэтилсвинца и провести её геометрическую оптимизацию полуэмпирическим методом PM6.</p> <p><b>Задание 2.</b> С использованием программы Spartan создать компьютерную модель молекулы трифенилфосфина и провести её геометрическую оптимизацию методом молекулярной механики в силовом поле SYBYL</p>	Правильно предложены методы для решения трех задач – 3 балла, двух задач – два балла, одной задачи – один балл, ни одного правильно предложенного метода – 0 баллов.
<b>Уметь:</b> составить аппаратно-программный комплекс, обеспечивающий решение поставленной задачи моделирования структуры и свойств молекул и молекулярных систем.	<p><b>Тест 1.</b> Для моделирования процессов самоорганизации в растворах полимеров методом молекулярной динамики</p> <p>А. Достаточно вычислительной мощности обычного ноутбука.  Б. С этой задачей справится настольный персональный компьютер;  В. Необходим компьютерный кластер или суперкомпьютер.</p> <p><b>Тест 2.</b> Для оптимизации геометрии молекул низкомолекулярных веществ методом полуэмпирической квантовой механики</p> <p>А. Достаточно вычислительной мощности обычного ноутбука.  Б. С этой задачей справится настольный персональный компьютер;  В. Необходим компьютерный кластер или суперкомпьютер.</p>	

<p><b>Знать:</b> возможности имеющегося программного обеспечения и вычислительной техники для моделирования свойств молекул и молекулярных систем.</p>	<p><b>Тест 1:</b> Укажите правильный ответ. Какая из программ пакета Schrodinger Materials Science Suite обеспечивает возможность проведения расчетов методом неэмпирической квантовой механики? А. Jaguar; Б. Macro Model; В. Desmond.</p> <p><b>Тест 2.</b> Укажите правильный ответ. Какой метод обеспечивает корректный расчёт парциальных зарядов атомов в молекуле? А. Молекулярной механики; Б. Полуэмпирической квантовой механики; В. Неэмпирической квантовой механики.</p>	<p>1 балл за правильный ответ</p>
--	---	-----------------------------------

**2. Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции М-ОПК-3.2. Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности**

<p><b>Этап формирования компетенции, в котором участвует дисциплина</b></p>	<p><b>Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков (2-3 примера)</b></p>	<p><b>Показатели и критерии оценивания компетенции, шкала оценивания</b></p>
<p><b>Владеть:</b> методиками составления компьютерных моделей молекул и молекулярных систем</p>	<p><b>Задание 1.</b> С использованием программы Mestro создать компьютерную модель 4-метилбензолсульфокислоты (пара-толуолсульфокислоты)</p> <p><b>Задание 2.</b> С использованием программы Maestro создать компьютерную модель 1,2-дихлорэтана</p>	<p>Задание выполнено правильно – 1 балл</p>
<p><b>Уметь:</b> подобрать метод моделирования, соответствующий поставленной задаче.</p>	<p><b>Тест 1.</b> Укажите правильные ответы. Для теоретического расчёта инфракрасного спектра бензола в программе Spartan можно использовать методы: А. Molecular Mechanics – SYBYL; Б. Semi-Empirical – PM6; В. Hartree-Fock – STO3G; Г. Density Functional – B3LYP – 6-31G** Д. Moller-Plesset – MP2 – cc-pVTZ</p> <p><b>Тест 2.</b> Укажите правильный ответ. Для моделирования молекулярного клубка макромолекулы полиэтилена можно использовать методы: А. Молекулярной динамики; Б. Молекулярной механики; В. Полуэмпирической квантовой механики; Г. Неэмпирической квантовой механики</p>	<p>1 балл за каждый правильный ответ.</p>
<p><b>Знать:</b> современные</p>	<p><b>Тест 1.</b> Укажите правильный ответ. На сегодняшний день наиболее часто</p>	<p>По каждому тесту:</p>



методы компьютерного химии моделирования структуры и свойств молекул и молекулярных систем.	<p>применяемым для оптимизации геометрии молекул является метод:</p> <p>А. Hartree-Fock – 3-21G;  Б. Density Functional – B3LYP – 6-31G  В. Moller-Plesset – MP2 – cc-pVTZ</p> <p><b>Тест 2.</b> Укажите правильный ответ. При расчете энергии молекулы методом DFT наибольшую точность обеспечит использование набора базисных функций</p> <p>А. cc-pVTZ;  Б. STO3G;  В. 6-31G.</p>	3 правильных ответа – 3 балла; 2 правильных ответа – 2 балла; 1 правильный ответ – 1 балл; Нет правильных ответов – 0 баллов.
---	--	--

## Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### 1) Рекомендуемая литература

#### а) Основная литература:

Бутырская Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView / Бутырская Е.В.. — Москва : СОЛОН-ПРЕСС, 2017. — 224 с. — ISBN 978-5-91359-095-4. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. — URL: <http://www.iprbookshop.ru/90299.html>

#### б) Дополнительная литература:

1. Белащенко Д.К. Компьютерные методы в физике и физической химии : лабораторный практикум / Белащенко Д.К.. — Москва : Издательский Дом МИСиС, 2012. — 109 с. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. — URL: <http://www.iprbookshop.ru/56068.html>

2. Бурмистрова Н.А. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие для студентов, обучающихся по направлению подготовки 04.03.01 «Химия» / Бурмистрова Н.А., Пожаров М.В., Смотров М.П.. — Саратов : Издательство Саратовского университета, 2020. — 68 с. — ISBN 978-5-292-04637-0. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. — URL: <http://www.iprbookshop.ru/106265.html>

### 2) Программное обеспечение

#### а) Лицензионное программное обеспечение

MS Windows 10, MS Office 2016, Gaussian 03, Hyper Chem

#### б) Свободно распространяемое программное обеспечение

MOPAC 2016, GAMESS, ORCA, Schrodinger Maestro, ISISDraw 2.4 Standalone

Google Chrome

Яндекс Браузер

Kaspersky Endpoint Security 10

3) Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

Explore Chemistry <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>

4) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

1. Электронная библиотека по химии и технике <http://rushim.ru/books/books.htm>
2. Химический портал ChemPort.Ru <http://www.chemport.ru>
3. Электронная библиотека учебных материалов по химии на портале Chemnet <http://www.chem.msu.su/rus/elibrary>
4. Российский химико-аналитический портал <http://www.anchem.ru/>
5. Сайт о химии <http://xumuk.ru/>
6. Сайт Chemworld.Narod.Ru -Мир химии <http://chemworld.narod.ru>

## **VI. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины**

### **Задания для самостоятельной работы студентов**

1. Создайте структурную формулу метилэтилкетона, дайте название соединения, рассчитайте его молярную массу, элементный состав и спектр ПМР.
2. Создайте трехмерную модель молекулы трифенилметана. Запустите молекулярно-динамический эксперимент и пронаблюдайте молекулярные колебания созданной модели.
3. Создайте трехмерную модель молекулы трифенилметана. Рассчитайте оптимальную конформацию и соответствующую энтальпию образования. Рассчитайте термодинамические характеристики молекулы и сравните с табличными данными.
4. Создайте структурную формулу изопропилового эфира масляной кислоты, дайте название соединения, рассчитайте его молярную массу, элементный состав и спектр ПМР.
5. Создайте трехмерную модель молекулы парафина, содержащего 30 углеродных атомов в цепи. Методом молекулярной динамики проведите компьютерный эксперимент по сворачиванию молекулярной цепи в глобулу.
6. Создайте трехмерную модель молекулы дипептида глицилаланина. Рассчитайте оптимальную конформацию и соответствующую энтальпию образования. Рассчитайте термодинамические характеристики молекулы и сравните с табличными данными.

## Вопросы для подготовки к зачету по дисциплине

1. Использование программы Chem 3D для создания моделей молекул.
2. Построение моделей путем импорта структурных формул, созданных в ChemDraw.
3. Построение моделей непосредственно в Chem 3D.
4. Создание моделей различного типа (шаростержневых, с визуализацией электронных орбиталей и др.).
5. Перевод моделей в структурные формулы (экспорт в Chem Draw).
6. Использование программы Spartan для создания моделей молекул. Создание моделей различного типа (шаростержневых, с визуализацией электронных орбиталей и др.).
7. Визуализация молекулярных колебаний методом молекулярной динамики
8. Получение моделей молекул в оптимальной конформации.
9. Использование полуэмпирических квантово-механических методов для расчета и визуализации оптимальной конформации молекул.
10. Расчет длины связей и размеров молекул. Расчет теоретических значений термодинамических констант для моделированных молекул.
11. Расчет инфракрасных спектров молекул.

## VII. Материально-техническое обеспечение

Проведение лекций обеспечено наличием переносной мультимедийной системы, состоящей из ноутбука и проектора.

## VIII. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины

№п.п.	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Реквизиты документа, утвердившего изменения
1.	Раздел V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	Добавлены новые пособия в основной список литературы	Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-технологического факультета
2.	Раздел V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	Добавлены новые пособия в список литературы	Протокол №10 от 27.06.2023г заседания ученого совета химико-технологического факультета