

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
ИТОГО	108	15	15	78

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
Владеть: навыками работы с программами, обеспечивающими реализацию методов молекулярной механики, молекулярной динамики и квантовой химии.	<p>Задание 1. С использованием программы Spartan создать компьютерную модель молекулы тетраэтилсвинца и провести её геометрическую оптимизацию полуэмпирическим методом PM6.</p> <p>Задание 2. 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.
Уметь: составить аппаратно-программный комплекс, обеспечивающий решение поставленной задачи моделирования структуры и свойств молекул и молекулярных систем.	<p>Тест 1. 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>Тест 2. 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>Знать: возможности имеющегося программного обеспечения и вычислительной техники для моделирования свойств молекул и молекулярных систем.</p>	<p>Тест 1: 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>Тест 2. 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>Этап формирования компетенции, в котором участвует дисциплина</p>	<p>Типовые контрольные задания для оценки знаний, умений, навыков (2-3 примера)</p>	<p>Показатели и критерии оценивания компетенции, шкала оценивания</p>
<p>Владеть: методиками составления компьютерных моделей молекул и молекулярных систем</p>	<p>Задание 1. С использованием программы Mestro создать компьютерную модель 4-метилбензолсульфокислоты (пара-толуолсульфокислоты)</p> <p>Задание 2. С использованием программы Maestro создать компьютерную модель 1,2-дихлорэтана</p>	<p>Задание выполнено правильно – 1 балл</p>
<p>Уметь: подобрать метод моделирования, соответствующий поставленной задаче.</p>	<p>Тест 1. 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>Тест 2. 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>Знать: современные</p>	<p>Тест 1. 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>Тест 2. 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