

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Лельчицкий Игорь Давыдович
Должность: и.о. проректора по образовательной деятельности
Дата подписания: 13.07.2026 14:57:26
Уникальный программный ключ:
aa5b5ee17d97a2e4d94e98e995320af94f043ce2

УП: 04.04.01 Химия
AX 2025.plx

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
ФГБОУ ВО «ТВЕРСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»



Утверждаю:

руководитель ООП

Никольский В.М.

28 мая 2026г.

Рабочая программа дисциплины

Физико-химические методы исследования

Закреплена за кафедрой:	Неорганической и аналитической химии
Направление подготовки:	04.04.01 Химия
Направленность (профиль):	Аналитическая химия
Квалификация:	Магистр
Форма обучения:	очная
Семестр:	2

Программу составил(и):

д-р хим. наук, проф., Алексеев Владимир Георгиевич

Тверь, 2026

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели освоения дисциплины (модуля):

Освоение современных расчетных физико-химических методов исследования.

Задачи :

Изучение теоретических основ современных методов компьютерного моделирования свойств молекул и молекулярных систем. Освоение работы с необходимым программным обеспечением.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ОП: Б1.О

Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Нанохимия

Компьютерные технологии в науке и образовании

Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:

Преддипломная практика

Методология научно-проектной деятельности

Научно-исследовательская работа

Управление научно-проектной деятельностью

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость	3 ЗЕТ
Часов по учебному плану	108
в том числе:	
самостоятельная работа	78

4. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

ОПК-1.2: Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук

- | | |
|-----------|---|
| Уровень 1 | возможности имеющегося программного обеспечения и вычислительной техники для моделирования свойств молекул и молекулярных систем. |
| Уровень 1 | составить аппаратно-программный комплекс, обеспечивающий решение поставленной задачи моделирования структуры и свойств молекул и молекулярных систем. |
| Уровень 1 | навыками работы с программами, обеспечивающими реализацию методов молекулярной механики, молекулярной динамики и квантовой химии. |

ОПК-3.2: Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности

- | | |
|-----------|---|
| Уровень 1 | современные методы компьютерного химии моделирования структуры и свойств молекул и молекулярных систем. |
| Уровень 1 | подобрать метод моделирования, соответствующий поставленной задаче. |

Уровень 1 методиками составления компьютерных моделей молекул и молекулярных систем

5. ВИДЫ КОНТРОЛЯ

Виды контроля в семестрах:	
зачеты	2

6. ЯЗЫК ПРЕПОДАВАНИЯ

Язык преподавания: русский.

7. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

№	Наименование разделов и тем	Вид занятия	Сем.	Часов	Примечание
---	-----------------------------	-------------	------	-------	------------

8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

8.1. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации

Задание 1. С использованием программы Spartan создать компьютерную модель молекулы тетраэтилсвинца и провести её геометрическую оптимизацию полуэмпирическим методом PM6.

Задание 2. С использованием программы Spartan создать компьютерную модель молекулы трифенилфосфина и провести её геометрическую оптимизацию методом молекулярной механики в силовом поле SYBYL

Тест 1. Для моделирования процессов самоорганизации в растворах полимеров методом молекулярной динамики

- А. Достаточно вычислительной мощности обычного ноутбука.
- Б. С этой задачей справится настольный персональный компьютер;
- В. Необходим компьютерный кластер.

Тест 2. Для оптимизации геометрии молекул низкомолекулярных веществ методом полуэмпирической квантовой механики

- А. Достаточно вычислительной мощности обычного ноутбука.
- Б. С этой задачей справится настольный персональный компьютер;
- В. Необходим компьютерный кластер.

Тест 3: 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.

Тест 4. Укажите правильный ответ. Какой метод обеспечивает корректный расчёт парциальных зарядов атомов в молекуле?

- А. Молекулярной механики;
- Б. Полуэмпирической квантовой механики;
- В. Неэмпирической квантовой механики.

8.2. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации

Задание 1. С использованием программы Maestro создать компьютерную модель 4-метилбензолсульфокислоты (пара-толуолсульфокислоты)

Задание 2. С использованием программы Maestro создать компьютерную модель 1,2-дихлорэтана

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

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

Тест 3. Укажите правильный ответ. На сегодняшний день наиболее часто применяемым для оптимизации геометрии молекул является метод:

- А. Hartree–Fock – 3-21G;
- Б. Density Functional – B3LYP – 6-31G
- В. Moller–Plesset – MP2 – cc-pVTZ

Тест 4. Укажите правильный ответ. При расчете энергии молекулы методом DFT наибольшую точность обеспечит использование набора базисных функций

- А. cc-pVTZ;
- Б. STO3G;
- В. 6-31G.

8.3. Требования к рейтинг-контролю

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

Рекомендуемая литература

Перечень программного обеспечения

1	Kaspersky Endpoint Security 10 для Windows
2	Adobe Acrobat Reader
3	Google Chrome
4	WinDjView
5	OpenOffice
6	VLC media player
7	ADE
8	Foxit Reader
9	Notepad++
10	STDU Viewer
11	ISIS Draw

12	ОС Linux Ubuntu
13	Многофункциональный редактор ONLYOFFICE
14	HyperChem

Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1	Архивы журналов издательства Nature
2	Архивы журналов издательства Oxford University Press
3	Ресурсы издательства Springer Nature
4	Электронная коллекция книг Оксфордского Российского фонда
5	БД Web of Science
6	БД Scopus
7	Журналы издательства Taylor&Francis
8	Журналы American Chemical Society (ACS)
9	Виртуальный читальный зал диссертаций Российской государственной библиотеки (РГБ)
10	Репозиторий ТвГУ
11	Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU (подписка на журналы)
12	ЭБС ТвГУ
13	ЭБС BOOK.ru
14	ЭБС «Лань»
15	ЭБС IPRbooks
16	ЭБС «Университетская библиотека онлайн»
17	ЭБС «ЮРАИТ»
18	ЭБС «ZNANIUM.COM»

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Аудит-я	Оборудование
3-404	комплект учебной мебели, переносной ноутбук, проектор, аквадистиллятор, весы, ИК Фурье спектрометр, компьютер, фотоколориметр КФК-2, электропечи
3-406	комплект учебной мебели, весы, лабораторные ионометры, портативные рН-метры, потенциостат-гальваностат, сканер, шкафы, компьютеры, гиря

11. 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 наблюдайте 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.

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>