



Основная профессиональная образовательная программа
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
(Фундаментальная и прикладная химия)

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ИВАНОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Кафедра фундаментальной и прикладной химии

ОДОБРЕНО:

Руководитель ОП Т.П. Кустова

29 августа 2024 г.

Рабочая программа дисциплины
Практикум по компьютерной химии

Уровень высшего образования:	специалитет
Квалификация выпускника:	Химик. Преподаватель химии
Специальность:	04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
Направленность (профиль) образовательной программы:	Фундаментальная и прикладная химия



Основная профессиональная образовательная программа
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
(Фундаментальная и прикладная химия)

1. Цели освоения дисциплины

Основной целью освоения дисциплины является закрепление и углубление теоретической подготовки и практических навыков обучающегося в области компьютерной химии и квантово-химических расчетов для выполнения научно-исследовательской работы, приобретение практических навыков работы в условиях научно-исследовательской лаборатории и последующего применения полученных знаний и умений в научно-исследовательской и педагогической деятельности.

2. Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина относится к части, формируемой участниками образовательных отношений, является дисциплиной по выбору.

Успешное освоение данной дисциплины будет способствовать готовности студентов к выполнению выпускной квалификационной работы и к профессиональной деятельности.

Для освоения данной дисциплины обучающийся должен:

Знать:

- основные химические понятия, химическую терминологию;
- основы квантовой механики и квантовой химии, приближения, используемые при решении уравнения Шредингера для молекул.

Уметь:

- самостоятельно ставить задачи исследования;
- выполнять анализ полученных результатов и оформлять его в виде отчета и презентации;
- выполнять расчеты геометрического строения, частот колебаний и электронных характеристик молекул полуэмпирическими методами с помощью программы HyperChem.

Владеть:

- практическими навыками формирования входных файлов для квантово-химических расчетов с помощью программ HyperChem, анализа результатов расчетов, который включает рассмотрение геометрического строения молекул, их колебательных спектров, молекулярного объема, диаграмм МО, энергии ионизации, зарядов на атомах, дипольных моментов.

Студент, приступающий к изучению дисциплины, должен обладать знаниями, умениями, навыками, полученными ранее в ходе изучения дисциплин: "Информатика и информационные технологии в химии", "Общая и неорганическая химия", "Аналитическая химия", "Квантовая механика и квантовая химия", "Структурная и компьютерная химия", "Физическая химия", "Органическая химия", "Кристаллохимия".

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

3.1. Компетенции, формированию которых способствует дисциплина

При освоении дисциплины формируются следующие компетенции в соответствии с ФГОС ВО по данному направлению подготовки:

а) профессиональные (ПК):

ПК-1 способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией наук.

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

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

Знать: основы квантовой механики и квантовой химии для критического анализа литературных данных и результатов собственного исследования, современные методы квантово-химических расчетов и методики интерпретации их результатов для разнообразных классов химических соединений, основные



Основная профессиональная образовательная программа
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
(Фундаментальная и прикладная химия)

особенности и возможности современных программ для квантово-химических расчетов, способы и методы поиска информации в электронных базах NIST, SDBS, BSE и банке кристаллографических данных CCDC, методику составления плана исследований на основе анализа литературы по сформулированной тематике, методику выбора вариантов расчетов для квантово-химического исследования; особенности структуры органических мезогенных молекул, взаимосвязь их химического строения со свойствами ЖК, особенности номенклатуры органических каламитных термотропных мезогенных соединений.

Уметь: анализировать научную литературу с целью выбора направления исследования по предлагаемой теме; выполнять исследования свойств молекулярных систем методами компьютерной химии.

Иметь: практические навыки выполнения расчетов свойств молекул разными квантово-химическими методами; навыки краткого и развернутого описания результатов теоретического исследования, выявленных закономерностей и особенностей в рядах исследуемых соединений; практический опыт исследования свойств молекулярных систем методами квантовой механики и квантовой химии, опыт выполнения расчетов геометрического строения, частот колебаний и электронных характеристик молекул квантово-химическими методами разного уровня.

4. Объем и содержание дисциплины

Объем дисциплины составляет 3 зачетных единиц (108 академических часов).

4.1. Содержание дисциплины по разделам (темам), соотнесенное с видами и трудоемкостью занятий лекционно-семинарского типа

Объем иной контактной работы и самостоятельной работы обучающегося по дисциплине указан в учебном плане образовательной программы.

№ п/п	Разделы (темы) дисциплины	Семестр	Виды занятий, их объем (в ак. часах, по очной форме обучения)		Формы текущего контроля успеваемости (по очной форме обучения)
			Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Формы промежуточной аттестации
1	Подготовительный этап: (знакомство с организацией научно-исследовательской деятельности в области компьютерной химии, выбор темы исследования). Инструктаж по технике безопасности.	10		4 лаб.з.	Собеседование: входная диагностика общих знаний по химии
2	Теоретический этап	10		26 лаб.з.	Составление и написание литературного обзора к ВКР
3	Практический (исследовательский) этап	10		20 лаб.з.	Согласование с заданием, ознакомление с методиками работы на оборудовании.
4	Систематизация и анализ полученных данных	10		30 лаб.з.	Протоколы выполненных экспериментов.
5	Подготовка отчета по практике. Написание отчета. Оформление презентации.	10		10 лаб.з.	Согласование данных и выводов отчета. Подготовка презентации. Защита результатов.
Итого за семестр:				90	Зачет с оценкой



4.2. Развернутое описание содержания дисциплины по разделам (темам)

1) Подготовительный этап, включающий инструктаж по технике безопасности, ознакомление с рабочей программой дисциплины.

2) Теоретический этап:

- работа с учебной литературой (методы квантово-химических расчетов, основные концепции и способы расчетов, программы для квантово-химических расчетов и визуализации их результатов, методика выполнения квантово-химических расчетов и анализа полученных результатов, симметрия в химии, основы теории жидкокристаллического состояния, особенности взаимосвязи структуры и свойств ЖК соединений, номенклатура calamитных термотропных ЖК, основные методы исследования ЖК, возможности компьютерной химии при изучении мезоморфных соединений);

- работа базами данных (SDBS, NIST, Кембриджская база кристаллографических данных и др.);

- работа с российскими и международными научными периодическими изданиями.

3) Практический этап:

- постановка целей и задач практического этапа;

- проведение квантово-химических расчетов геометрического и электронного строения молекул (на примере молекул мезогенов, либо их структурных предшественников), исследование структурной нежесткости исследуемых объектов, поиск возможных конформеров, расчет частот колебаний и построение теоретического колебательного спектра, расчет электронного спектра поглощения и испускания, выполнение NBO-анализа распределения электронной плотности в молекуле.

4) Систематизация и анализ полученных данных. Оформление отчета.

5. Образовательные технологии

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине: технологии смешанного обучения. В процессе преподавания дисциплины используются технологии проблемного обучения, личностно-ориентированные технологии, а также проектная, рейтинговая, технология развития критического мышления; методы дискуссии, групповой работы и решения ситуационных задач, «дебаты».

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

При самостоятельной работе (СРС) студентам предлагается использовать материалы и литературу из доступных электронно-библиотечных систем и различных электронных ресурсов.

На первом вводном занятии по дисциплине студентов знакомят с порядком освоения всего курса, а также последовательностью прохождения практикума и проведения лабораторных занятий. Особое внимание уделяется подробному разъяснению методики проведения СРС по дисциплине, а также технике безопасности при выполнении студентами исследовательской работы. Выполняется разбор основных особенностей проведения компьютерного эксперимента, а так же разбор типовых ошибок при обработке полученного материала. Подробно рассматривается: правила написания литературного обзора, порядок оформления графической и расчетной частей полученного задания, указывается на правильность написания выводов развернутого характера.

Методический материал по обеспечению самостоятельной работы студентов приводится в приложении 1 к РП.



Основная профессиональная образовательная программа
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
(Фундаментальная и прикладная химия)

7. Характеристика оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

Контроль за ходом прохождения практикума по экспериментальной химии осуществляется:

- еженедельными консультациями студента с преподавателем;
- проверкой преподавателем ведения лабораторного журнала и оформлением отчетов;
- выступлением студентов по тематике работы в рамках заключительной конференции по дисциплине.

К защите результатов прохождения практикума студент представляет отчет и лабораторный журнал (дневник прохождения практикума), где зафиксировано ежедневное проведение конкретной работы - 40 баллов

При защите результатов прохождения практикума студент готовит иллюстрационный материал (презентация в PowerPoint), отражающий основные полученные результаты (литературный обзор, теоретическая часть, результаты квантово-химических расчетов), делает доклад (продолжительностью не более 10 минут), в котором излагает полученные результаты, дает их интерпретацию, зачитывает выводы. Затем студент отвечает на вопросы по тематике работы (60 баллов).

Методические указания по организации и особенности оформления отчетов находятся в приложении 2 к РП в разделе «Фонд оценочных средств».

Зачет получают студенты, набравшие более 55 баллов за семестр, выполнившие программу практикума, получившие положительную оценку при защите результатов отчета и положительный отзыв о работе.

Студенты, набравшие менее 55 баллов за семестр, не выполнившие программу практикума, получившие отрицательный отзыв о работе или неудовлетворительную оценку при защите отчета, получают оценку «не зачтено».

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Основная литература:

1. Ведринский Р.В. Квантовая механика [Электронный ресурс] : учебник / Ведринский Р.В. – Ростов н/Д: ЮФУ, 2009 – 384 с. Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=240937>
2. Ефремов Ю.С. Квантовая механика [Электронный ресурс] : учебное пособие / Ефремов Ю.С. – М.-Берлин: Директ-Медиа, 2015. – 457 с. Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=273446>
3. Крашенинин В.И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам [Электронный ресурс] : учебное пособие / Крашенинин В.И. , Газенаур Е.Г. , Кузьмина Л.В. – Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2012. – 56 с. Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678>
4. Федоров М.С. Жидкокристаллические материалы : учебное пособие / М.С. Федоров. – Иваново : Иван. гос. ун-т, 2018. – 120 с. Режим доступа: http://lib.ivanovo.ac.ru:81/elib/dl/biology/ucheb/fedorov_2018.htm/view

Дополнительная литература:

1. Магазинников, А.Л. Введение в квантовую механику: учебное пособие / А.Л. Магазинников, В.А. Мухачёв. - Томск: Эль Контент, 2010. - 112 с.: ил.,табл., схем. - ISBN 978-5-4332-0046-3; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=208685>.



Основная профессиональная образовательная программа
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
(Фундаментальная и прикладная химия)

2. Карлов, Н.В. Начальные главы квантовой механики / Н.В. Карлов, Н.А. Кириченко. - Москва: Физматлит, 2006. - 360 с. - ISBN 5-9221-0538-8; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=68397>.
3. Сибгатуллина А.М. Организация проектной и научно-исследовательской деятельности [Электронный ресурс]: учебное пособие/ Сибгатуллина А.М. – Йошкар-Ола: Поволжский государственный технологический университет, 2012.-92с. Режим доступа: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_view&book_id=277052
4. Стрельникова, А.Г. Дипломная работа: подготовка и оформление / А.Г. Стрельникова. – СПб: СпецЛит, 2010. – 95 с. – ISBN 978-5-299-00443-4; То же [Электронный ресурс]. – URL:<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=105507>.

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

Система электронной поддержки образовательного процесса «Мой университет»
<https://uni.ivanovo.ac.ru>.

Профессиональные базы данных и информационно-справочные системы:

ЭБС «Университетская библиотека онлайн» [www.biblioclub.ru](http://lib.ivanovo.ac.ru/index.php/polnotekstovye-resursy/ebs-universitetskaya-biblioteka);
<http://lib.ivanovo.ac.ru/index.php/polnotekstovye-resursy/ebs-universitetskaya-biblioteka>

Электронная библиотека ИвГУ <http://lib.ivanovo.ac.ru/index.php/polnotekstovye-resursy/elibnew>

Электронный каталог НБ ИвГУ <http://lib.ivanovo.ac.ru/index.php/ek>

База данных физико-химических характеристик соединений NIST <https://webbook.nist.gov/>

Спектральная база данных SDBS https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/cre_index.cgi

База данных базисных наборов <https://www.basissetexchange.org/>

Системы поиска научной информации: <http://elibrary.ru/>; <http://www.sciencedirect.com/>

Сайт научного журнала «Жидкие кристаллы и их практическое использование»
<http://nano.ivanovo.ac.ru/journal/>

Сайт научного журнала «Журнал структурной химии» <https://jsc.niic.nsc.ru/>

Программное обеспечение: операционная система Microsoft Windows, пакет офисных программ Microsoft Office, интернет-браузер Internet Explorer, Мой университет, программы для квантово-химических расчетов Gaussian-03w, HyperChem; Кембриджская База Кристаллографических Данных CCDB; программа визуализации результатов квантово-химических расчетов Chemcraft Lite.

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Учебные аудитории:

- для проведения занятий семинарского типа, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации с комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения;

Лаборатория, оснащенная лабораторным оборудованием, комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения.

Помещение для самостоятельной работы, оснащенное комплектом специализированной учебной мебели, компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в ЭИОС.

Демонстрационное оборудование и учебно-наглядные пособия для занятий лекционного типа, обеспечивающие тематические иллюстрации:



Основная профессиональная образовательная программа
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
(Фундаментальная и прикладная химия)

Автор рабочей программы дисциплины: доцент кафедры фундаментальной и прикладной химии, к.х.н. Федоров М.С.

Программа рассмотрена и утверждена на заседании кафедры фундаментальной и прикладной химии 29 августа 2024 г., протокол № 14.

Программа обновлена
протокол заседания кафедры № _____ от «_____» _____ 20__ г.

Согласовано:

Руководитель ОП _____ Т.П. Кустова
(подпись)