

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования_
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского»**

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО

решением президиума Ученого совета ННГУ

протокол № 1 от 16.01.2024 г.

Рабочая программа дисциплины

Молекулярное моделирование

Уровень высшего образования

Магистратура

Направление подготовки / специальность

04.04.01 - Химия

Направленность образовательной программы

Физическая химия

Форма обучения

очно-заочная

г. Нижний Новгород

2024 год начала подготовки

1. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина Б1.В.03.ДВ.02.01 Молекулярное моделирование относится к части, формируемой участниками образовательных отношений образовательной программы.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства	
	Индикатор достижения компетенции (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине	Для текущего контроля успеваемости	Для промежуточной аттестации
ПК-1-н: Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии и/или смежных с химией наук	ПК-1-н-1: Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий ПК-1-н-2: Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	ПК-1-н-1: Умеет определять общий и детализированный план решения задач физической химии методами молекулярного моделирования Знает основные способы и методы молекулярного моделирования Владеет навыками планирования моделирования ПК-1-н-2: Умеет определять необходимый метод для решения задач физической химии Знает возможности и ограничения современных методов молекулярного моделирования Владеет навыками применения методов молекулярного моделирования	Практическая задача	Зачёт: Контрольные вопросы
ПК-2-н: Способен проводить информационные исследования в выбранной области химии, химической технологии и/или смежных с химией наук	ПК-2-н-1: Проводит поиск специализированной информации в информационных базах данных ПК-2-н-2: Анализирует и обобщает результаты информационного поиска по тематике проекта в выбранной области химии	ПК-2-н-1: Умеет выполнять поиск информации, необходимой для осуществления молекулярного моделирования и анализа результатов Знает основные базы данных и информационные ресурсы для осуществления молекулярного моделирования и анализа	Контрольная работа	Зачёт: Контрольные вопросы

	и/или смежных с химией науках	<p>результатов</p> <p>Владеет навыками информационного поиска</p> <p>ПК-2-н-2:</p> <p>Умеет анализировать и обобщать результаты информационного поиска</p> <p>Знает возможности и ограничения используемых информационных ресурсов</p> <p>Владеет навыками анализа и обобщения результатов информационного поиска</p>		
--	-------------------------------	---	--	--

3. Структура и содержание дисциплины

3.1 Трудоемкость дисциплины

	очно-заочная
Общая трудоемкость, з.е.	3
Часов по учебному плану	108
в том числе	
аудиторные занятия (контактная работа):	
- занятия лекционного типа	18
- занятия семинарского типа (практические занятия / лабораторные работы)	18
- КСР	1
самостоятельная работа	71
Промежуточная аттестация	0
	Зачёт

3.2. Содержание дисциплины

(структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий)

Наименование разделов и тем дисциплины	Всего (часы)	в том числе			
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них			Самостоятельная работа обучающегося, часы
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа (практические занятия/лабораторные работы), часы	Всего	
	0 3 Ф 0	0 3 Ф 0	0 3 Ф 0	0 3 Ф 0	0 3 Ф 0
1. Общие вопросы молекулярного моделирования	12	2	2	4	8

2. Электронная структура молекул и ее квантовохимическое описание	21	4	4	8	13
3. Современные методы квантовохимического расчета.	14	2	2	4	10
4. Основные типы компьютерного эксперимента.	12	2	2	4	8
5. Квантовохимический расчет структуры, колебательных частот и ТД параметров вещества.	12	2	2	4	8
6. Молекулярно-динамические расчеты коллективных характеристик.	12	2	2	4	8
7. Расчеты спектральных характеристик вещества.	12	2	2	4	8
8. Расчеты физико-химических свойств в конденсированном состоянии.	12	2	2	4	8
Аттестация	0				
КСР	1			1	
Итого	108	18	18	37	71

Содержание разделов и тем дисциплины

1. Понятие о молекулярном моделировании. Объекты исследования методами молекулярного моделирования
2. Квантовохимические модели. Методы волновой функции. Методы функционала плотности. Классификация методов квантовой химии по уровню точности и вычислительным затратам
3. Полуэмпирические методы. Неэмпирические методы. Теория функционала плотности. Методы учета электронной корреляции. Композитные методы квантовой химии.
4. Базисные наборы. Псевдопотенциалы.
4. Оптимизация молекулярной геометрии. Расчет колебательных частот и ТД свойств. Поиск переходных состояний и расчет констант скорости. Расчет электронных и спектральных параметров при фиксированной геометрии. Учет влияния среды.
4. Классические модели внутри- и межмолекулярных взаимодействий. Молекулярная механика.
5. Молекулярная динамика. Основные алгоритмы интегрирования. Алгоритмы поддержки структурных ограничений.
6. ТД ансамбли в молекулярной динамике. Алгоритмы поддержания термодинамических условий.
7. МД расчеты коэффициентов диффузии. Расчет свободных энергий координации. Оценка параметров упорядочения и их изменений при фазовых переходах.
8. Квантовая МД. Методы типа Кара-Парринелло.
9. Использование и возможности МД в задачах материаловедения, биомедицинской химии, биофизической химии.
10. Моделирование методом Монте-Карло. Алгоритм с простой случайной выборкой. Алгоритм Метрополиса. Ограничения метода МК.
11. Возможности и использование метода Монте-Карло в задачах физической химии, материаловедения, биофизической химии.
12. Молекулярный докинг и его применение в биомедицинской химии.

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа обучающихся включает в себя подготовку к контрольным вопросам и заданиям для текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины приведенным в п. 5.

Для обеспечения самостоятельной работы обучающихся используются:

Электронные курсы, созданные в системе электронного обучения ННГУ:

Молекулярное моделирование, <https://e-learning.unn.ru/course/view.php?id=3597>.

Иные учебно-методические материалы:

-

5. Фонд оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

5.1 Типовые задания, необходимые для оценки результатов обучения при проведении текущего контроля успеваемости с указанием критериев их оценивания:

5.1.1 Типовые задания (оценочное средство - Практическая задача) для оценки сформированности компетенции ПК-1-н:

Задание 1. Какие методы лучше применить для установления молекулярной структуры и расчета ИК спектра пропилового эфира бензойной кислоты?

Задание 2. Какой метод и базис лучше подходят для высокоточного расчета структуры молекулы О₃.

Критерии оценивания (оценочное средство - Практическая задача)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Допустимый уровень знаний выше минимального. Продемонстрированы основные умения. При решении типовых заданий могут быть негрубые ошибки. Имеется набор навыков выше минимального для решения стандартных задач с некоторыми недочетами
не зачтено	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки. При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения и базовые навыки. Или невозможность оценить наличие знаний, умений и навыков вследствие отказа обучающегося от ответа.

5.1.2 Типовые задания (оценочное средство - Контрольная работа) для оценки сформированности компетенции ПК-2-н:

Оптимизировать геометрию и рассчитать адиабатический потенциал ионизации молекул NH₃ и CH₄ на уровне B3LYP/6-31G(d,p). Сравнить рассчитанные структурные параметры и потенциалы ионизации с экспериментальными величинами.

Критерии оценивания (оценочное средство - Контрольная работа)

Оценка	Критерии оценивания
превосходно	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки. Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи.

Оценка	Критерии оценивания
	Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов. Продемонстрирован творческий подход к решению нестандартных задач.
отлично	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок. Продемонстрированы все основные умения, решены все основные задачи с отдельными несущественным недочетами, выполнены все задания в полном объеме. Продемонстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов.
очень хорошо	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок. Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами. Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов.
хорошо	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок. Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами. Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.
удовлетворительно	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок. Продемонстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме. Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторыми недочетами.
неудовлетворительно	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки. При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения и базовые навыки.
плохо	Отсутствие знаний теоретического материала. Отсутствие минимальных умений. Отсутствие владения материалом. Невозможность оценить наличие знаний, умений и навыков вследствие отказа обучающегося от ответа.

5.2. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине при промежуточной аттестации

Шкала оценивания сформированности компетенций

Уровень сформированности компетенций (индикатора достижения)	плохо	неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	очень хорошо	отлично	превосходно
	не зачтено		зачтено				

ения компет							
<u>Знания</u>	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Ошибок нет.	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки.
<u>Умения</u>	Отсутствие минимальных умений. Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки	Продemonстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с отдельными и несущественными недочетами, выполнены все задания в полном объеме	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов
<u>Навыки</u>	Отсутствие базовых навыков. Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки	Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторыми недочетами	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов	Продemonстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов	Продemonстрирован творческий подход к решению нестандартных задач

Шкала оценивания при промежуточной аттестации

Оценка		Уровень подготовки
зачтено	превосходно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «превосходно», продемонстрированы знания, умения, владения по соответствующим компетенциям на уровне выше предусмотренного программой
	отлично	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично».
	очень хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо»
	хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо».

	удовлетворительно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «удовлетворительно», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «удовлетворительно»
не зачтено	неудовлетворительно	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно».
	плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

5.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения на промежуточной аттестации с указанием критериев их оценивания:

5.3.1 Типовые задания (оценочное средство - Контрольные вопросы) для оценки сформированности компетенции ПК-1-н

1. Характеристики основных методов молекулярного моделирования (квантовохимическое моделирование, моделирование методом молекулярной динамики и Монте-Карло)
2. Уравнение Шредингера, что оно позволяет установить?
3. Какую информацию о молекуле можно извлечь из волновой функции молекулы?
4. Основные типы компьютерного эксперимента.
5. Какие современные квантовохимические методы вы знаете?
6. Какие базисные наборы для выполнения квантовохимических расчетов вы знаете?
7. Какие расчеты нужно провести для оценки ТД параметров индивидуального вещества в состоянии идеального газа?
8. Какие точки ППЭ нужно найти для оценки ТД константы равновесия реакции?
9. Какие точки ППЭ нужно найти для оценки константы скорости прямой реакции?
10. Какие характеристики позволяют определить молекулярно-динамические расчеты?
12. Что такое оптимизация молекулярной геометрии?
13. Чем отличается поиск переходных состояний от оптимизации геометрии?
14. Какие методы применяются для оценки свойств кристаллических твердых тел?
15. Какие методы расчета электронных спектров вы знаете?

5.3.2 Типовые задания (оценочное средство - Контрольные вопросы) для оценки сформированности компетенции ПК-2-н

16. Какие программы для выполнения квантовохимических расчетов вы знаете?
17. Какие программы можно применить для расчета электронных спектров молекул?

18. Какие программы для визуализации результатов молекулярного моделирования вы знаете?
19. Какие базы данных для получения необходимых атомных базисных наборов вы знаете?
20. Какие базы данных экспериментальных структурных характеристик молекулы кристаллов вы знаете?
21. Какие базы данных экспериментальных физико-химических свойств вы знаете?

Критерии оценивания (оценочное средство - Контрольные вопросы)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	Допустимый уровень знаний выше минимального. Продемонстрированы основные умения. При решении типовых заданий могут быть негрубые ошибки. Имеется набор навыков выше минимального для решения стандартных задач с некоторыми недочетами
не зачтено	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки. При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения и базовые навыки. Или невозможность оценить наличие знаний, умений и навыков вследствие отказа обучающегося от ответа.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

Основная литература:

1. Минкин В. И. Теория строения молекул : учеб. пособие. - 2-е изд., перераб. и доп. - Ростов н/Д : Феникс, 1997. - 560 с. - (Учебники и учебные пособия). - 37.80., 1 экз.
2. Молекулярное моделирование: теория и практика / Хельтс Х.-Д.; Зиппл В.; Роньян Д.; Фолькерс Г. - Москва : Лаборатория знаний, 2020. - 322 с. - ISBN 978-5-00101-724-0., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=736430&idb=0>.
3. Игнатов Станислав Константинович. Задачи по квантовой химии : учебно-методическое пособие / С. К. Игнатов ; ННГУ им. Н. И. Лобачевского. - Нижний Новгород : Изд-во ННГУ, 2015. - 28 с. - Текст : электронный., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=850287&idb=0>.
4. Игнатов Станислав Константинович. Квантовохимическое моделирование атомно-молекулярных процессов : учеб. пособие для студентов ННГУ, обучающихся по направлению подгот. 04.04.01 "Химия" / С. К. Игнатов ; ННГУ. - Нижний Новгород : Изд-во ННГУ, 2019. - 93 с. - ISBN 978-5-91326-563-0 : 325.45., 2 экз.

Дополнительная литература:

1. Кларк Тим. Компьютерная химия : практ. рук. по расчетам структуры и энергии молекул / пер. с англ. А. А. Коркина ; под ред. В. С. Матрюкова, Ю. Н. Панченко. - М. : Мир, 1990. - 381, [3] с. : ил. - ISBN 5-03-001325-3 : 2.20., 1 экз.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы (в соответствии с содержанием дисциплины):

<https://www.qchem.unn.ru/>

<https://www.coursera.org/learn/modeling-simulation-natural-processes>

<http://www.tandf.co.uk/journals/titles/08927022.asp>

<http://www.lmms.ru/>

<https://web.archive.org/web/20051230142353/http://cmm.info.nih.gov/modeling/>

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных образовательной программой, оснащены мультимедийным оборудованием (проектор, экран), техническими средствами обучения.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечены доступом в электронную информационно-образовательную среду.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ННГУ по направлению подготовки/специальности 04.04.01 - Химия.

Автор(ы): Игнатов Станислав Константинович, доктор химических наук, профессор.

Заведующий кафедрой: Маркин Алексей Владимирович, доктор химических наук.

Программа одобрена на заседании методической комиссии от 28.09.2023 г, протокол № 1.