

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 Ученого совета ННГУ

протокол № 6 от 31.05.2023 г.

Рабочая программа дисциплины

Молекулярное моделирование

Уровень высшего образования

Магистратура

Направление подготовки / специальность

04.04.01 - Химия

Направленность образовательной программы

Физическая химия

Форма обучения

очная, очно-заочная

г. Нижний Новгород

2023 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 науках | 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 Практическая задача |
| ПК-2-н: Способен проводить информационные исследования в выбранной области химии, химической технологии и/или смежных с химией науках | 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 области физической 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 | Практическая задача | Зачёт: Контрольные вопросы Практическая задача |

| | | | | |
|--|-------------------------------|---|--|--|
| | 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

| | очная | очно-заочная |
|--|--------------------------|--------------------------|
| Общая трудоемкость, з.е. | 3 | 3 |
| Часов по учебному плану | 108 | 108 |
| в том числе | | |
| аудиторные занятия (контактная работа): | | |
| - занятия лекционного типа | 32 | 36 |
| - занятия семинарского типа (практические занятия / лабораторные работы) | 32 | 36 |
| - КСР | 1 | 1 |
| самостоятельная работа | 43 | 35 |
| Промежуточная аттестация | 0 зачёт | 0 зачёт |

3.2. Содержание дисциплины

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

| Наименование и краткое содержание 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 | | | |
| | о ф о | о з ф о | о ф о | о з ф о | о ф о | о з ф о | о ф о | о з ф о | о ф о | о з ф о |
| 1. Общие вопросы молекулярного моделирования | 14 | 12 | 4 | 4 | 4 | 4 | 8 | 8 | 6 | 4 |

| | | | | | | | | | | |
|--|-----|-----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| 2. Электронная структура молекул и ее квантовохимическое описание | 14 | 18 | 4 | 6 | 4 | 6 | 8 | 12 | 6 | 6 |
| 3. Современные методы квантовохимического расчета. | 14 | 17 | 4 | 6 | 4 | 6 | 8 | 12 | 6 | 5 |
| 4. Основные типы компьютерного эксперимента. | 13 | 12 | 4 | 4 | 4 | 4 | 8 | 8 | 5 | 4 |
| 5. Квантовохимический расчет структуры, колебательных частот и ТД параметров вещества. | 13 | 12 | 4 | 4 | 4 | 4 | 8 | 8 | 5 | 4 |
| 6. Молекулярно-динамические расчеты коллективных характеристик. | 13 | 12 | 4 | 4 | 4 | 4 | 8 | 8 | 5 | 4 |
| 7. Расчеты спектральных характеристик вещества. | 13 | 12 | 4 | 4 | 4 | 4 | 8 | 8 | 5 | 4 |
| 8. Расчеты физико-химических свойств в конденсированном состоянии. | 13 | 12 | 4 | 4 | 4 | 4 | 8 | 8 | 5 | 4 |
| Аттестация | 0 | 0 | | | | | | | | |
| КСР | 1 | 1 | | | | | 1 | 1 | | |
| Итого | 108 | 108 | 32 | 36 | 32 | 36 | 65 | 73 | 43 | 35 |

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Для обеспечения самостоятельной работы обучающихся используются:

- электронный курс "Молекулярное моделирование" (<https://e-learning.unn.ru/course/view.php?id=3597>).
- открытый онлайн-курс МООС "-" (-).

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 современные квантовохимические методы вы знаете?

Задание 2. Какие методы лучше применить для установления молекулярной структуры и расчета ИК спектра пропилового эфира бензойной кислоты?

Задание 3. Какой метод и базис лучше подходят для высокоточного расчета структуры молекулы О₃.

5.1.2 Типовые задания (оценочное средство - Практическая задача) для оценки сформированности компетенции ПК-2-н

Задание 1. Какие базы данных надо использовать, чтобы оценить точность проведенного расчета структурных характеристик молекулы С₆Н₅ОН?

Задание 2. Какие базы данных вы бы использовали, чтобы оценить точность проведенного расчета энтальпии реакции образования воды из водорода и кислорода?

Задание 3. Какой базой данных вы бы воспользовались для поиска базисных наборов при расчете соединения UF₆.

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. |

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

Шкала оценивания сформированности компетенций

| Уровень сформированности компетенций (индикатора достижения компетенций) | плохо | неудовлетворительно | удовлетворительно | хорошо | очень хорошо | отлично | превосходно |
|--|---|--|--|---|--|---|--|
| | не зачтено | | зачтено | | | | |
| <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 | Продемонстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме | Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами | Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами | Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с отдельными и несущественными недочетами, выполнены все задания в полном объеме | Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов |
| <u>Навыки</u> | Отсутствие базовых навыков. | При решении стандартных задач не | Имеется минимальный набор | Продемонстрированы базовые | Продемонстрированы базовые | Продемонстрированы навыки | Продемонстрирован творческий |

| | | | | | | | |
|--|--|--|--|---|---|--|--------------------------------------|
| | Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа | продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки | навыков для решения стандартных задач с некоторым и недочетами | навыки при решении стандартных задач с некоторым и недочетами | навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов | при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов | 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

5.3.1 Типовые задания, выносимые на промежуточную аттестацию:

Оценочное средство - Контрольные вопросы

Зачёт

Критерии оценивания (Контрольные вопросы - Зачёт)

| 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 | Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки. При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения и базовые |

| Оценка | Критерии оценивания |
|---------|--|
| зачтено | навыки. Или невозможность оценить наличие знаний, умений и навыков вследствие отказа обучающегося от ответа. |

Типовые задания (Контрольные вопросы - Зачёт) для оценки сформированности компетенции 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 науках)

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?

Типовые задания (Контрольные вопросы - Зачёт) для оценки сформированности компетенции ПК-2-н (Способен проводить информационные исследования в выбранной области химии, химической технологии и/или смежных с химией науках)

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?

Оценочное средство - Практическая задача

Зачёт

Критерии оценивания (Практическая задача - Зачёт)

| 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. |

Типовые задания (Практическая задача - Зачёт) для оценки сформированности компетенции 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 науках)

Задание 1. Какие современные квантовохимические методы вы знаете?

Задание 2. Какие методы лучше применить для установления молекулярной структуры и расчета ИК спектра пропилового эфира бензойной кислоты?

Задание 3. Какой метод и базис лучше подходят для высокоточного расчета структуры молекулы Оз.

Типовые задания (Практическая задача - Зачёт) для оценки сформированности компетенции ПК-2-н (Способен проводить информационные исследования в выбранной области химии, химической технологии и/или смежных с химией науках)

Задание 1. Какие базы данных надо использовать, чтобы оценить точность проведенного расчета структурных характеристик молекулы C_6H_5OH ?

Задание 2. Какие базы данных вы бы использовали, чтобы оценить точность проведенного расчета энтальпии реакции образования воды из водорода и кислорода?

Задание 3. Какой базой данных вы бы воспользовались для поиска базисных наборов при расчете соединения UF_6 .

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

Основная литература:

- 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.
- 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-](https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=850287&idb=0)

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. Мاستрюкова, 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 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 25.05.2023 г., протокол № 7.