

Белорусский государственный университет

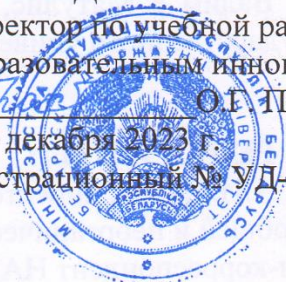
УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе
и образовательным инновациям

 О.И. Прохоренко

«22» декабря 2023 г.

Регистрационный № УД- 1048 /м.



ОСНОВЫ СИНЕРГЕТИКИ

**Учебная программа учреждения высшего образования
по учебной дисциплине для специальности:**

7-06-0531-01 Химия

профилизация:

Химический дизайн новых материалов

2023 г.

Учебная программа составлена на основе ОСВО 7-06-0531-01-2023, типового учебного плана №7-06-05-001/пр., утвержденного 17.11.2022 г., учебного плана М44-5.5-04/уч. от 29.12.2022 г.

СОСТАВИТЕЛИ:

Вадим Э. Матулис, доцент кафедры неорганической химии Белорусского государственного университета, кандидат химических наук, доцент.

РЕЦЕНЗЕНТЫ:

А.И. Кулак, директор Государственного научного учреждения «Институт общей и неорганической химии Национальной академии наук Беларуси», член-корреспондент НАН Беларуси, доктор химических наук, профессор

Ю.В. Григорьев, заведующий лабораторией химии конденсированных сред Учреждения БГУ «Научно-исследовательский институт физико-химических проблем», кандидат химических наук

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой неорганической химии
(протокол № 5 от 4 декабря 2023 г.).

Научно-методическим Советом БГУ
(протокол № 4 от 21.12.2023 г.)

Зав.кафедрой _____

Свиридов Д.В.

Белорусский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе
и образовательным инновациям

_____ О.Г. Прохоренко

«22» декабря 2023 г.

Регистрационный № УД- 1048 /м.

ОСНОВЫ СИНЕРГЕТИКИ

**Учебная программа учреждения высшего образования
по учебной дисциплине для специальности:**

7-06-0531-01 Химия

профилизация:

Химический дизайн новых материалов

2023 г.

Учебная программа составлена на основе ОСВО 7-06-0531-01-2023, типового учебного плана №7-06-05-001/пр., утвержденного 17.11.2022 г., учебного плана М44-5.5-04/уч. от 29.12.2022 г.

СОСТАВИТЕЛИ:

Вадим Э. Матулис, доцент кафедры неорганической химии Белорусского государственного университета, кандидат химических наук, доцент.

РЕЦЕНЗЕНТЫ:

А.И. Кулак, директор Государственного научного учреждения «Институт общей и неорганической химии Национальной академии наук Беларуси», член-корреспондент НАН Беларуси, доктор химических наук, профессор

Ю.В. Григорьев, заведующий лабораторией химии конденсированных сред Учреждения БГУ «Научно-исследовательский институт физико-химических проблем», кандидат химических наук

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой неорганической химии
(протокол № 5 от 4 декабря 2023 г.).

Научно-методическим Советом БГУ
(протокол № 4 от 21.12.2023 г.)

Зав.кафедрой _____ Свиридов Д.В.

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Цель дисциплины – сформировать у магистрантов представления о синергетических подходах к описанию процессов, протекающих в сложных динамических системах.

Задачи дисциплины – познакомить магистрантов с основными понятиями синергетики; рассмотреть математический аппарат описания сложных динамических систем и анализа их временной эволюции; познакомиться с применением синергетики к описанию систем, в которых протекают химические реакции.

Место учебной дисциплины в системе подготовки специалиста с углубленным высшим образованием.

Учебная дисциплина «Основы синергетики» для специальности 7-06-0531-01 Химия, профилизации «Химический дизайн новых материалов» входит в модуль «2.5 Иерархические структуры» компонента учреждения высшего образования.

Дисциплина «Основы синергетики» предназначена для изучения во втором семестре.

Данный курс связан с такими дисциплинами, как «Высшая математика», «Информатика», «Физическая химия» и может быть прочитан после изучения указанных дисциплин.

Требования к компетенциям

Освоение учебной дисциплины «Основы синергетики» должно обеспечить формирование следующих компетенций, предусмотренных образовательным стандартом углубленного высшего образования по специальности 7-06-0531-01 Химия, профилизации «Химический дизайн новых материалов»:

СК-5 Применять теоретические положения к описанию иерархических структур и сложных динамических систем; анализировать временную динамику сложных систем и делать выводы о прогнозировании их поведения в будущем.

В результате освоения учебной дисциплины студент должен:

знать:

- принципиальные различия между консервативными и диссипативными структурами;
- роль ограничений и неравновесности в возникновении диссипативных структур;
- начальные представления о путях перехода в сложных динамических системах от хаоса к порядку и наоборот;
- виды дескрипторов молекулярной структуры;

уметь:

- составлять модели химических процессов и анализировать полученные решения;

- рассчитывать дескрипторы молекулярной структуры;
владеть:
- подходами к прогнозированию временной эволюции систем;
- современными программными пакетами для квантово-химических расчетов.

Структура учебной дисциплины

Дисциплина изучается во втором семестре. Всего на изучение учебной дисциплины «Основы синергетики» отведено:

для очной формы получения высшего образования – 90 часов, в том числе 36 аудиторных часа, из них: лекции – 12 часов, практические занятия – 20 часов, из них 8 часов – дистанционное обучение, управляемая самостоятельная работа – 4 часа.

Трудоемкость учебной дисциплины составляет 3 зачетные единицы.

Форма промежуточной аттестации – зачет.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Тема 1. Консервативные и диссипативные системы

Явления самоорганизации в диссипативных системах. Примеры из различных областей и трудности в описании с помощью классических подходов.

Консервативные (Гамильтоновы) системы и диссипативные системы. Равновесные и неравновесные системы. Ограничения в неравновесных системах и их роль в возникновении диссипативных структур.

Тема 2. Переход от периодических режимов к хаосу

Системы с монотонной и немонотонной эволюцией. Примеры и подходы к описанию.

Свободный осциллятор. Понятие о фазовом пространстве, фазовой траектории и фазовом портрете системы.

Осциллятор с затуханием, осциллятор с вынуждающей силой. Их описание, состояние и фазовые портреты.

Тема 3. Дескрипторы молекулярной структуры

Виды молекулярных дескрипторов. Квантово-химические дескрипторы. Расчеты полных и π -зарядов на атомах, энергий молекулярных орбиталей, молекулярных электростатических потенциалов и других молекулярных дескрипторов в программном пакете Gaussian.

Тема 4. Прогнозирование свойств веществ на основе квантов-химических дескрипторов

Реакционная способность карбонильных соединений, полинуклеофилов и др. Кинетический и термодинамический контроль.

Раздел 5. Диссипативные динамические структуры в химии

Моделирование химических динамических систем. Реакция Белоусова-Жаботинского в системах с перемешиванием. Периодические и хаотические режимы. Реакция БЖ в неоднородной системе. Пространственные и пространственно-временные структуры в реакции БЖ.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА

Дневная форма получения образования с применением дистанционных образовательных технологий

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов					Количество часов УСП	Форма контроля знаний
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное		
1.	Консервативные и диссипативные системы	2	2 (ДОТ)					Собеседование
2.	Переход от периодических режимов к хаосу	2	2 (ДОТ)					Собеседование
3.	Дескрипторы молекулярной структуры	2	4 (2 ДОТ)				2	Контрольная работа
4.	Прогнозирование свойств веществ на основе квантов-химических дескрипторов	4	12				2	Тест, Контрольная работа
5.	Диссипативные динамические структуры в химии	2	2 (ДОТ)					Тест
	Итого	12	20				4	

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Перечень основной литературы

1. П. Берже, И. Помо, К. Видаль. Порядок в хаосе. М.: Мир, 1991.
2. Г. Николис, И. Пригожин. Познание сложного. М.: Мир, 1990.
3. И. Пригожин, И. Стенгерс. Порядок из хаоса. М.: Едиториал УРСС, 2003.
4. Г.Николис, И.Пригожин. Самоорганизация в неравновесных системах. М.: Мир, 1979.
5. L. Wang, J. Ding, L. Pan, D. Cao, H. Jiang, X. Ding, Quantum chemical descriptors in quantitative structure–activity relationship models and their applications / Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems. – 2021. – Vol. 217. – P. 104384.

Перечень дополнительной литературы

6. Г.Хакен. Синергетика. М.: Мир 1980.
7. Е.Н.Князева, С.П.Кюрдюмов. Законы эволюции и самоорганизация сложных систем. М.: Наука, 1994.
8. И.Пригожин. От существующего к возникающему. М.: Наука, 1985.
9. И.Пригожин, Д.Кондепути. Современная термодинамика. М.: Мир, 2002 г. (гл. 5. Порядок через флуктуации. 5.18 – Нелинейная термодинамика, 5.19 – Диссипативные структуры).
10. Foresman J.B., Frisch A. Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods. Gaussian; 3rd edition, 2015.
11. E. Y. Grigoryev, I. M. Grigorieva, A. S. Lyakhov, L. S. Ivashkevich, Vadim E. Matulis, L. G. Lavrenova, S. V. Voitekhovich, Y. V. Grigoriev / 2,6-Di(1H-tetrazol-1-yl)pyridine and its cupric chloride complex // Z. Anorg. Allg. Chem. – 2023 – Vol. 649. – P. e202200290.

Перечень рекомендуемых средств диагностики и методика формирования итоговой отметки

Учебным планом по направлению специальности: 7-06-0531-01 Химия, профилизации «Химический дизайн новых материалов» в качестве формы промежуточной аттестации по учебной дисциплине «Основы синергетики» рекомендован зачет.

Для текущей оценки достижений и контроля качества усвоения знаний студентами используется следующий диагностический инструментарий:

- выполнение тестовых заданий;
- письменные контрольные работы по отдельным темам;
- собеседование по отдельным темам;
- сдача зачета по учебной дисциплине.

Примерный перечень заданий для управляемой самостоятельной работы студентов

Тема: Дескрипторы молекулярной структуры

Задание. Для молекулы формальдегида рассчитать полные заряды на атомах и построить контурные карты молекулярного электростатического потенциала в разных плоскостях.

Перечень средств диагностики:

1. Выполнение заданий на СДО <https://educhem.bsu.by>
2. Контрольная работа

Тема: Прогнозирование свойств веществ на основе квантов-химических дескрипторов

Задание. Выполнить количественную оценку применимости различных квантово-химических дескрипторов для прогнозирования реакционной способности карбонильных соединений при взаимодействии с нуклеофилами.

Перечень средств диагностики:

1. Выполнение заданий на СДО <https://educhem.bsu.by>
2. Контрольная работа

Примерная тематика практических занятий

1. Преобразование Фурье дискретного сигнала. Анализ спектра мощности дискретного сигнала. Идентификация периодических (с учетом шумов) режимов.
2. Размерность Хаусдорфа. Корреляционная размерность множества. Определение корреляционной размерности множества (дискретного сигнала).
3. Расчеты π -зарядов на атомах.

4. Построение контурных карт молекулярных электростатических потенциалов.
5. Прогнозирование свойств веществ на основе квантов-химических дескрипторов (реакционная способность карбонильных соединений, полинуклеофилов и др.).
6. Кинетический и термодинамический контроль.

Описание инновационных подходов и методов к преподаванию учебной дисциплины

При организации образовательного процесса используются *эвристический и практико-ориентированный подходы*, которые предполагают:

- демонстрацию многообразия решений профессиональных задач;
- индивидуализацию обучения через возможность самостоятельно ставить цели, осуществлять рефлексию собственной образовательной деятельности;
- освоение содержания образования через решения практических задач.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы обучающихся

При изучении учебной дисциплины рекомендуется использовать следующие формы самостоятельной работы:

- поиск и обзор литературы и электронных источников по заданной проблеме курса;
- выполнение домашнего задания;
- решение задач, предлагаемых на практических занятиях;
- подготовка к практическим семинарским занятиям; – научно-исследовательские работы;
- составление моделей и проведение расчетов.

Примерный перечень вопросов к зачету

1. Системы с монотонной и немонотонной эволюцией. Примеры и подходы к описанию.
2. Консервативные (Гамильтоновы) системы и диссипативные системы.
3. Равновесные и неравновесные системы.
4. Моделирование химических динамических систем.
5. Реакция Белоусова-Жаботинского в системах с перемешиванием. Периодические и хаотические режимы.
6. Пространственные и пространственно-временные структуры в реакции БЖ.

7. Виды молекулярных дескрипторов.
8. Квантово-химические дескрипторы.
9. Полные и π -заряды на атомах.
10. Молекулярный электростатический потенциал.
11. Использование квантово-химических дескрипторов для прогнозирования свойств карбонильных соединений.
12. Использование квантово-химических дескрипторов для прогнозирования свойств полинуклеофилов.
13. Кинетический и термодинамический контроль.
14. Моделирование процессов в растворах.

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УВО

Название учебной дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы учреждения высшего образования по учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул	Кафедра неорганической химии	Отсутствуют	Утвердить согласование без внесения изменений (протокол № 5 от 4 декабря 2023 г.)

**ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ ПО
ИЗУЧАЕМОЙ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ**

на ____ / ____ учебный год

№ п/п	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
_____ (протокол № ____ от _____ 20_ г.)

Заведующий кафедрой

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета
