БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ
Ректор Белорусского
государственного университета
_____А.Д.Король
27 июня 2025 г.
Регистрационный № 3172/м.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРОЕНИЯ И РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ МОЛЕКУЛ

Учебная программа учреждения образования по учебной дисциплине для специальности:

7-06-0531-01 Химия

Профилизация: Химический дизайн новых материалов

2025 г.

Учебная программа составлена на основе ОСВО 7-06-0531-01-2023, учебного плана № М44-5.5-42/уч. от 23.05.2025.

СОСТАВИТЕЛИ:

А.Н.Рябцев, доцент кафедры органической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук, доцент;
Вадим Э.Матулис, доцент кафедры неорганической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук;
Виталий Э.Матулис, доцент кафедры неорганической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук

РЕЦЕНЗЕНТЫ:

А.И.Кулак, директор Государственного научного учреждения «Институт общей и неорганической химии Национальной академии наук Беларуси», академик 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 БГУ
(протокол № 10 от 06.06.2025)

Научно-методическим советом БГУ
(протокол № 11 от 26.06.2025)

Заведующий кафедрой _____ Д.В.Свиридов

Т.В. Ковальчук-Рабцевская

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ

Ректор Белорусского
государственного университета

_____А.Д.Король

27 июня 2025 г.
Регистрационный № 3172/м.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРОЕНИЯ И РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ МОЛЕКУЛ

Учебная программа учреждения образования по учебной дисциплине для специальности:

7-06-0531-01 Химия

Профилизация: Химический дизайн новых материалов

2025 г.

Учебная программа составлена на основе ОСВО 7-06-0531-01-2023, учебного плана № М44-5.5-42/уч. от 23.05.2025.

СОСТАВИТЕЛИ:

А.Н.Рябцев, доцент кафедры органической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук, доцент;
Вадим Э.Матулис, доцент кафедры неорганической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук;
Виталий Э.Матулис, доцент кафедры неорганической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук

РЕЦЕНЗЕНТЫ:

А.И.Кулак, директор Государственного научного учреждения «Институт общей и неорганической химии Национальной академии наук Беларуси», академик 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 БГУ
(протокол № 10 от 06.06.2025)

Научно-методическим советом БГУ
(протокол № 11 от 26.06.2025)

Заведующий кафедрой _____ Д.В.Свиридов

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Цели и задачи учебной дисциплины

Цель дисциплины – сформировать у магистрантов представления о современных квантово-химических методах расчета молекул и моделирования химических реакций.

Задачи дисциплины – знакомство студентов с современными методами моделирования строения и реакционной способности молекул и развитие представлений о границах применимости различных квантово-химических методов. От студента требуется не только усвоение теоретических вопросов, но и умение решать конкретные задачи с использованием программных пакетов для квантово-химических расчетов.

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

Учебная дисциплина «Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул» входит в модуль «Компьютерная химия» государственного компонента.

Дисциплина «Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул» предназначена для изучения во втором семестре.

Дисциплина может быть прочитана после изучения таких общих дисциплин, как «Неорганическая химия», «Органическая химия», «Физическая химия», «Квантовая химия и строение молекул».

Требования к компетенциям

Освоение учебной дисциплины «Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул» должно обеспечить формирование следующих компетенций:

Универсальные компетенции:

Применять психолого-педагогические методы и информационно-коммуникационные технологии в образовании и управлении

Углубленные профессиональные компетенции:

Применять методы химической информатики, молекулярной динамики, компьютерного и математического моделирования для обоснованного описания структуры и свойств химических систем и их поведения в химических процессах.

В результате освоения учебной дисциплины студент должен:

знать:

- современные расчетные методы квантовой химии (неэмпирические, полуэмпирические и DFT);
- стандартные базисные наборы, использующиеся при проведении неэмпирических и DFT расчетов;
- методы учета электронной корреляции;
- методы учета влияния растворителя;

уметь:

- с использованием программных пакетов для квантово-химических расчетов выполнять оптимизацию геометрии молекул;

- рассчитывать индексы реакционной способности молекул;
- рассчитывать структуры переходных состояний химических реакций;

иметь навык:

- расчета молекулярных свойств, термодинамических и кинетических характеристик химических реакций.

Структура учебной дисциплины

Дисциплина изучается во 2 семестре. В соответствии с учебным планом всего на изучение учебной дисциплины «Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул» отведено **для очной формы** получения высшего образования – 132 часа, в том числе 44 аудиторных часа: лекции – 20 часов, лабораторные занятия – 20 часов, семинарские занятия – 4 часа. **Из них:**

Лекции – 20 часов, лабораторные занятия – 12 часов + 8 часов ДОТ, семинарские занятия – 2 часа, управляемая самостоятельная работа – 2 часа ДОТ.

Трудоемкость учебной дисциплины составляет 3 зачетные единицы.

Форма промежуточной аттестации – экзамен.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Тема 1. Введение

Программные пакеты для квантово-химических расчетов структуры и свойств молекулярных систем. Сравнение возможностей расчетных и экспериментальных методов изучения структуры и реакционной способности молекул.

Тема 2. Основные этапы выполнения неэмпирических и полуэмпирических расчетов

Подготовка входного задания к программным пакетам для проведения квантово-химических расчетов. Ключевые слова, управляющие работой программы для квантово-химических расчетов (задание метода расчета и базисного набора, вычисление энергии, оптимизация геометрии, расчет зарядов на атомах, спектров, учет влияния растворителя). Сведения о заряде, мультиплетности, стартовых геометрических параметрах молекулы для входного задания. Z-матрица. Примеры входных заданий для программного пакета Gaussian. Анализ результатов расчетов. Структура текстовых output-файлов. Программные пакеты, позволяющие обрабатывать и визуализировать результаты расчётов. Примеры output-файлов программного пакета Gaussian и визуализация результатов с помощью GaussView.

Тема 3. Поверхность потенциальной энергии двухатомных молекул

Поверхность потенциальной энергии двухатомных молекул, точки минимумов и максимумов, градиент энергии, частоты нулевых колебаний.

Тема 4. Оптимизация геометрии многоатомных молекул

Оптимизация геометрии многоатомных молекул к минимуму, верификация типа стационарной точки. Оптимизация геометрии переходного состояния, верификация типа стационарной точки и проверка соответствия найденной структуры переходному состоянию в конкретной химической реакции. Сканирование поверхности потенциальной энергии. Примеры входных заданий и otput-файлов программного пакета Gaussian.

Тема 5. Приближение МО ЛКАО

Волновая функция молекулы в однодетерминантном приближении. Приближение МО ЛКАО. Орбитальные энергии и коэффициенты молекулярных орбиталей. Графическое представление молекулярных орбиталей. Малликеновские заряды на атомах.

Тема 6. Стандартные базисные наборы гауссовских функций

Стандартные базисные наборы гауссовских функций (минимальные, валентно-расщепленные, базисные наборы с поляризационными и диффузными функциями, базисные наборы с эффективным потенциалом). Примеры входных заданий и otput-файлов программного пакета Gaussian.

Тема 7. Полуэмпирические методы

Характеристика полуэмпирических методов. Параметризация.

Тема 8. Электронная корреляция. Теория функционала плотности

Ограничения метода Хартри-Фока. Электронная корреляция и методы Post-SCF: конфигурационного взаимодействия и многоконфигурационного ССП (CISD, CISDT, CISDTQ, full CI и MCSCF), теория возмущений Меллера-Плессета MP*n*. Теория функционала плотности (DFT). Примеры входных заданий для программного пакета Gaussian. Затраты компьютерного времени при расчетах разными методами.

Тема 9. Анализ NBO

Анализ NBO. Делокализация π-электронов. Способы определения энергии делокализации π-электронов. Локализованные молекулярные орбитали.

Тема 10. Молекулярный электростатический потенциал

Молекулярный электростатический потенциал. Графическое представление распределения молекулярного электростатического потенциала при помощи программного пакета GaussView.

Тема 11. Исследование реакционной способности веществ

Принципы расчета термодинамических характеристик методами квантовой химии. Сродство к электрону. Потенциал ионизации. Кислотность и основность в газовой фазе. Расчеты тепловых эффектов химических реакций. Изодесмические реакции. Расчеты энтальпии образования вещества. Расчеты энергии активации химических реакций.

Тема 12. Моделирование процессов в растворах

Дискретные и континуумные модели растворителя. SCRF модели растворителя. Исследование влияния растворителя на протекание химических реакций.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Очная (дневная) форма получения высшего образования с применением дистанционных образовательных технологий (ДОТ)

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов					Количество часов УСР	Форма контроля
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное		
1	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**	**9**
1	Введение	2						опрос
2	Основные этапы выполнения неэмпирических и полуэмпирических расчетов	2			2			опрос, отчет (СДО)
3	Поверхность потенциальной энергии двухатомных молекул	2			2			опрос, отчет (СДО)
4	Оптимизация геометрии многоатомных молекул			2	2 (ДОТ)			отчет (СДО), контрольная работа
5	Приближение МО ЛКАО	2			2			тест
6	Стандартные базисные наборы гауссовских функций	2			2 (ДОТ)			тест
7	Полуэмпирические методы	2			2			опрос, отчет (СДО)
8	Электронная корреляция. Теория функционала плотности	2					2 (ДОТ)	отчет (СДО)

9	Анализ NBO	2			2			отчет (СДО)
10	Молекулярный электростатический потенциал				2 (ДОТ)			отчет (СДО)
11	Исследование реакционной способности веществ	2			2			тест
12	Моделирование процессов в растворах	2			2 (ДОТ)			контрольная работа

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Основная литература

1. Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул / Я. В. Диченко. - Минск : Беларуская навука, 2023. - 137 с.

2. Молекулярное моделирование : теория и практика / Х.-Д. Хёльтье [и др.] ; пер. с англ. А. А. Олиференко [и др.] под ред. В. А. Палюлина, Е. В. Радченко. - Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2020. - 319 с.

Дополнительная литература

1. Матулис, В. Э. Прикладная квантовая химия : учеб. пособие для студ. хим. и физ. спец. учрежд., обеспеч. получение высшего образования / Вадим Э. Матулис, Виталий Э. Матулис, О. А. Ивашкевич. - Минск : БГУ, 2007. - 144 с.

2. Кларк Т. Компьютерная химия. – М.: Мир, 1990.

3. Liu, S. Conceptual Density Functional Theory, 2 Volume Set: Towards a New Chemical Reactivity Theory. Wiley, 2022.

4. Foresman J.B., Frisch A. Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods. Gaussian; 3rd edition, 2015.

5. Бейдер Р. Атомы в молекулах: Квантовая теория. М.: Мир, 2001.

6. Mulliken R.S. Electron Population Analysis on LCAO-MO Molecular Wave Functions // J. Chem. Phys. – 1955. – Vol. 23. – P. 1833-1840.

7. Mulliken R.S. Electron Population Analysis on LCAO-MO Molecular Wave Functions. II. Overlap Populations, Bond Orders and Covalent Bond Energies // J. Chem. Phys. – 1955. – Vol. 23. – P. 1841-1846.

8. Alcami M., Mó O., Yáñez M. A Molecular Orbital Study of Azole-Li+ Complexes // J. Phys. Chem. - 1989. - Vol. 93. - P. 3929-3936.

9. Alcami M., Mó O., Yáñez M. Enhanced Al+ Binding Energies of Some Azoles. A Theoretical Study of Azole-X+ (X = Na, K, Al) Complexes // J. Phys. Chem. - 1992. - Vol. 96. - P. 3022-3029.

10. Chen Z.X., Xiao J.M., Chiu Y.N. Studies on Heats of Formation for Tetrazole Derivatives with Density Functional Theory B3LYP Method // J. Phys. Chem. A. – 1999. – Vol. 103, N 40. – P. 8062-8066.

11. Gonzalez C., Schlegel H.B. Reaction Path Following in Mass-Weighted Internal Coordinates // J. Phys. Chem. – 1990. – Vol. 94. – P. 5523-5527.

12. Pranata J. Ab initio Study of the Base-Catalyzed Hydrolysis of Methyl Formate // J. Phys. Chem. – 1994. - Vol. 98. - P. 1180-1184.

13. Williams I.H., Spangler D., Femec D.A. Theoretical Models for Transition-State Structure and Catalysis in Carbonyl Addition // J. Am. Chem. Soc. – 1980. - Vol. 102. - P. 6619-6621.

14. Williams H.I., Spangler D., Femec D.A. Theoretical Models for Solvation and Catalysis in Carbonyl Addition // J. Am. Chem. Soc. – 1983. - Vol. 105. - P. 31-40.

15. Wong M.W., Frisch M.J., Wiberg K.B. Solvent Effects. 1. The Mediation of Electrostatic Effects by Solvent // J. Am. Chem. Soc. – 1991. – Vol. 113. – P. 4776-4782.

16. Matulis Vadim E., Lyakhov A.S., Gaponik P.N., Voitekhovich S.A., Ivashkevich O.A. 1,5-Diamino-1H-1,2,3,4-tetrazolium picrate: X-ray molecular and crystal structure and ab initio MO calculations // J. Mol. Struct. – 2003. – Vol. 649. – P. 309-314.

17. Halauko Y.S., Matulis Vadim E., Ivashkevich O.A., Grigoriev Y.V., Gaponik P.N. DFT calculations of CH acidity of substituted triazoles and experimental study of their ability to undergo mercuration // Tetrahedron. – 2010. – Vol. 66. – P. 3415-3420.

18. V. A. Budevich, S. V. Voitekhovich, A. V. Zuraev, Vadim E. Matulis, Vitaly E. Matulis, A. S. Lyakhov, L. S. Ivashkevich, O. A. Ivashkevich / Mesoionic tetrazolium-5-aminides: Synthesis, Molecular and Crystal Structures, UV-Vis Spectra, and DFT Calculations // Beilstein J. Org. Chem. – 2021. – Vol. 17. – P. 385-395.

19. S. V. Voitekhovich, A. S. Lyakhov, L. S. Ivashkevich, Vadim E. Matulis, Y. V. Grigoriev, J. Klose, B. Kersting, O. A. Ivashkevich / 5-Amino-2-isopropenyltetrazole and its Cupric Chloride Complex: Synthesis, Structure and Magnetism // Z. Anorg. Allg. Chem. – 2022. – Vol. 648. – P. e202200213 (1-9).

20. 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

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

- выполнение тестовых заданий;
- выполнение заданий с составлением отчета на СДО;
- письменные контрольные работы по отдельным темам.

Формой промежуточной аттестации по дисциплине «Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул» учебным планом предусмотрен экзамен.

Для формирования итоговой отметки по учебной дисциплине используется модульно-рейтинговая система оценки знаний студента, дающая возможность проследить и оценить динамику процесса достижения целей обучения. Рейтинговая система предусматривает использование весовых коэффициентов для текущей и промежуточной аттестации студентов по учебной дисциплине.

Формирование итоговой отметки в ходе проведения контрольных мероприятий текущей аттестации (примерные весовые коэффициенты, определяющие вклад текущей аттестации в отметку при прохождении промежуточной аттестации):

выполнение тестовых заданий – 33,(3) %;

выполнение заданий с составлением отчета на СДО – 33,(3) %;

письменные контрольные работы по отдельным темам – 33,(3) %;

Итоговая отметка по дисциплине рассчитывается на основе итоговой отметки текущей аттестации (модульно-рейтинговой системы оценки знаний) 50 % и экзаменационной отметки 50 %.

Примерный перечень заданий для управляемой самостоятельной работы

Тема 8. Электронная корреляция. Теория функционала плотности *(2 ч ДОТ)*

Проблема выбора метода расчета (учет электронной корреляции).

Выполнить расчет теплового эффекта химической реакции различными методами.

(Форма контроля – отчет (СДО)).

Примерный перечень лабораторных занятий

1. Построение Z-матрицы и использование программного пакета GaussView для подготовки входного задания. Структура текстовых output-файлов.
2. Поверхность потенциальной энергии двухатомных молекул, точки минимумов и максимумов, градиент энергии, частоты нулевых колебаний.
3. Оптимизация геометрии многоатомных молекул к минимуму и седловой точке, верификация типа стационарной точки.
4. Графическое представление молекулярных орбиталей. Малликеновские заряды на атомах.
5. Исследование влияния вида и величины базисного набора на результаты квантовохимических расчетов.
6. Расчеты характеристик молекул и тепловых эффектов реакций полуэмпирическими методами.
7. Способы определения энергии делокализации π-электронов. Локализованные молекулярные орбитали.
8. Графическое представление распределения молекулярного электростатического потенциала при помощи программного пакета GaussView.
9. Расчеты тепловых эффектов химических реакций. Изодесмические реакции. Расчеты энтальпии образования вещества.
10. SCRF модели растворителя. Расчеты энергии активации химических реакций.

Примерная тематика семинарских занятий

1. Сканирование поверхности потенциальной энергии в программе Gaussian

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

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 экзамену

1. Программные пакеты для квантово-химических расчетов структуры и свойств молекулярных систем. Сравнение возможностей расчетных и экспериментальных методов изучения структуры и реакционной способности молекул.
2. Ключевые слова, управляющие работой программы для квантово-химических расчетов. Z-матрица.
3. Оптимизация геометрии молекул к минимуму, верификация типа стационарной точки. Локальный и глобальный минимумы на ППЭ.
4. Оптимизация структуры переходного состояния, верификация типа стационарной точки. Сканирование поверхности потенциальной энергии.
5. Волновая функция молекулы в однодетерминантном приближении..
6. Приближение МО ЛКАО. Орбитальные энергии и коэффициенты молекулярных орбиталей. Графическое представление молекулярных орбита-лей. ВЗМО и НСМО.
7. Минимальные и валентно-расщепленные базисные наборы. Базисные наборы с поляризационными и диффузными функциями. Базисные наборы с эффективным потенциалом.
8. Ограничения метода Хартри-Фока. Электронная корреляция и методы Post-SCF.
9. Малликеновские заряды на атомах.
10. Способы определения энергии делокализации □-электронов.

11. Графическое представление распределения молекулярного электростатического потенциала при помощи программного пакета GaussView.

12. Принципы расчета термодинамических характеристик методами квантовой химии.

13. Кислотность и основность в газовой фазе. Расчеты тепловых эффектов химических реакций.

14. Расчеты энтальпии образования вещества. Изодесмические реакции.

15. Моделирование процессов в растворах.

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УО

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)
Основы синергетики	Кафедра неорганической химии	Предложения отсутствуют	Рекомендовать к утверждению учебную программу (протокол № 10 от 06.06.2025)

Заведующий кафедрой неорганической химии
член-корреспондент НАН Беларуси
доктор химических наук, профессор _____ Д.В.Свиридов

06.06.2025

ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ УО

на _____/_____ учебный год

№ п/п	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
_____ (протокол № ____ от _____ 202_ г.)

Заведующий кафедрой
_____ _____

УТВЕРЖДАЮ
Декан факультета
_____ _____