БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ
Ректор Белорусского
государственного университета
_____А.Д.Король
27 июня 2025 г.
Регистрационный № 3173/м.

ОСНОВЫ СИНЕРГЕТИКИ

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:

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

РЕЦЕНЗЕНТ:

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-Рабчинская

2

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ

Ректор Белорусского
государственного университета

_____А.Д.Король

27 июня 2025 г.
Регистрационный № 3173/м.

ОСНОВЫ СИНЕРГЕТИКИ

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:

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

РЕЦЕНЗЕНТ:

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 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» входит в модуль «Супрамолекулярная химия» компонента учреждения образования.

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:

Специализированные компетенции:

Анализировать комплекс химических и физических взаимодействий в надмолекулярных химических системах, иметь представлении об инженерии кристаллов в супрамолекулярном дизайне.

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;

иметь навык:

- прогнозирования временной эволюции систем;

- использования современных пакетов для квантово-химических расчетов при проведении исследований

Структура учебной дисциплины

Дисциплина изучается во 2 семестре. В соответствии с учебным планом всего на изучение учебной дисциплины «Основы синергетики» отведено **для очной формы** получения высшего образования – 96 часов, в том числе 32 аудиторных часа: лекции – 12 часов, практические занятия – 16 часов, семинарские занятия – 4 часа. **Из них:**

Лекции – 12 часов, практические занятия – 12 часов + 4 часа ДОТ, управляемая самостоятельная работа – 4 часа ДОТ.

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.

Тема 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 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.	Консервативные и диссипативные системы	2						опрос
2.	Переход от периодических режимов к хаосу	2						опрос
3.	Дескрипторы молекулярной структуры	2	4 (ДОТ)				2	отчет (СДО), контрольная работа
4.	Прогнозирование свойств веществ на основе квантов-химических дескрипторов	4	12				2	отчет (СДО), контрольная работа
5.	Диссипативные динамические структуры в химии	2						опрос

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Основная литература

1. Егоров, В. В. Химическая синергетика. Теоретические и прикладные аспекты / В. В. Егоров, Б. М. Кершенгольц. — Санкт-Петербург : Лань, 2023. — 184 с.
2. Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул : монография / Я. В. Диченко. — Минск : Белорусская наука, 2023. — 137 с.

Дополнительная литература

1. Г.Хакен. Синергетика. М.: Мир 1980.
2. Е.Н.Князева, С.П.Кюрдюмов. Законы эволюции и самоорганизация сложных систем. М.: Наука, 1994.
3. И.Пригожин. От существующего к возникающему. М.: Наука, 1985.
4. И.Пригожин, Д.Кондепути. Современная термодинамика. М.: Мир, 2002 г. (гл. 5. Порядок через флуктуации. 5.18 – Нелинейная термодинамика, 5.19 – Диссипативные структуры).
5. Foresman J.B., Frisch A. Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods. Gaussian; 3rd edition, 2015.
6. 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 диагностики компетенций могут использоваться следующие средства текущей аттестации:

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

Формой промежуточной аттестации по дисциплине «Основы синергетики» учебным планом предусмотрен зачёт.

Примерный перечень заданий для управляемой самостоятельной работы

Тема 3. Дескрипторы молекулярной структуры (2 ч)

Расчеты дескрипторов молекулярной структуры в программе Gaussian.

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

(Форма контроля – отчет (СДО), контрольная работа).

Тема 4. Прогнозирование свойств веществ на основе квантов-химических дескрипторов (2 ч)

Реакции карбонильных соединений с нуклеофилами.

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

(Форма контроля – отчет (СДО), 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).
6. Прогнозирование свойств веществ на основе квантов-химических дескрипторов: реакционная способность полинуклеофилов).
7. Кинетический и термодинамический контроль.
8. Прогнозирование селективности протекания химических реакций при термодинамическом и кинетическом контроле.

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;

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. Расчет полных и π-зарядов на атомах в программе Gaussian.
11. Молекулярный электростатический потенциал.
12. Построение контурных карт молекулярного электростатического потенциала в программе Gaussian. Прогнозирования направлений протонирования.
13. Использование квантово-химических дескрипторов для прогнозирования свойств карбонильных соединений.
14. Использование квантово-химических дескрипторов для прогнозирования свойств полинуклеофилов.
15. Кинетический и термодинамический контроль.
16. Прогнозирование селективности протекания химических реакций при термодинамическом контроле
17. Прогнозирование селективности протекания химических реакций при кинетическом контроле.
18. Моделирование процессов в растворах.
19. Исследование влияния природы растворителя на равновесное содержание таутомерных форм гетероциклов.
20. Расчет констант ионизации веществ 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)
Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул	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
_____ _____