

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого»
Институт сельского хозяйства и природных ресурсов

Кафедра фундаментальной и прикладной химии



А.М. Козина
«30» ноября 2016 г.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В ХИМИИ

Учебный модуль по специальности
04.05.01 – фундаментальная и прикладная химия

Рабочая программа

СОГЛАСОВАНО

Начальник учебного отдела

Л.Б. Даниленко

«29» ноября 2016 г.

Разработали

старший преподаватель кафедры ФПХ

В.А. Исаков
зав. кафедрой ФПХ

И.В. Зыкова
«24» ноября 2016 г.

Принято на заседании кафедры
Протокол № 3 от 25.11.2016 г.

Заведующий кафедрой
И.В. Зыкова

«25» ноября 2016 г.

1 Цели и задачи учебного модуля

Цель учебного модуля (УМ) состоит в том, чтобы сформировать у студентов навыки решения задач профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств.

Задачи УМ:

1. изучить теоретические основы статистических методов анализа;
2. изучить методы планирования, организации и оптимизации эксперимента;
3. изучить теоретические основы квантово-химических расчетов молекулярных систем и механизмов химических реакций.

2 Место учебного модуля в структуре ОП специальности 04.05.01 фундаментальная и прикладная химия

Учебный модуль «Вычислительные методы в химии» изучается в 5 семестре, входит в базовую часть ОП специальности 04.05.01 фундаментальная и прикладная химия.

Изучение дисциплины базируется на знаниях, полученных при изучении математики, физики, информатики, неорганической и аналитической химии.

В процессе освоения курса «Вычислительные методы в химии» студенты готовятся к изучению следующих дисциплин: квантовая химия, кристаллохимия, физические методы исследования, моделирование химико-технологических процессов.

3 Требования к результатам освоения учебного модуля

Процесс изучения УМ направлен на формирование компетенции: способность решать задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и вычислительных средств с учетом основных требований информационной безопасности (ОПК-4).

В результате освоения УМ студент должен знать, уметь и владеть:

Код компетенции	Уровень освоения компетенции	Знать	Уметь	Владеть
ОПК-4	базовый	теоретические основы статистических методов анализа; методы планирования, организации и оптимизации эксперимента; теоретические основы квантово-химических расчетов молекулярных систем и механизмов химических реакций.	обоснованно осуществлять выбор статистического метода для обработки экспериментальных данных; строить математические модели изучаемого химического процесса; прогнозировать структуру, свойства и механизм химических реакций с помощью квантово-химических расчетов.	методами статистической обработки экспериментальных результатов химических и биологических исследований; методами моделирования и оптимизации химического эксперимента; методами квантово-химических расчетов молекулярных систем и механизмов химических реакций в программном пакете Gaussian.

4 Структура и содержание учебного модуля

4.1 Трудоемкость учебного модуля

В структуре УМ выделены учебные элементы модуля (УЭМ) в качестве самостоятельных разделов.

Учебная работа (УР)	Всего	Распределение по семестрам	Коды формируемых компетенций
		5	
Трудоемкость модуля в зачетных единицах (ЗЕТ)		3	
Распределение трудоемкости по видам УР в академических часах (АЧ):			
<i>1) УЭМ 1 Статистические методы в химии</i>			
- лекции	6	6	ОПК-4
- практические занятия	3	3	
- лабораторные работы			
- аудиторная СРС	3	3	
- внеаудиторная СРС	9	9	
<i>2) УЭМ 2 Планирование и организация эксперимента</i>			
- лекции	12	12	ОПК-4
- практические занятия	6	6	
- лабораторные работы			
- аудиторная СРС	6	6	
- внеаудиторная СРС	18	18	
<i>2) УЭМ 3 Квантово-химические расчеты молекулярных систем и механизма химических реакций</i>			
- лекции	9	9	ОПК-4
- практические занятия	18	18	
- лабораторные работы			
- аудиторная СРС	9	9	
- внеаудиторная СРС	27	27	
Аттестация:			
- зачет			

4.2 Содержание и структура разделов учебного модуля

УЭМ 1 Статистические методы в химии

1.1 Введение

Предмет вычислительных методов в химии. Структура вычислительных методов в химии. Значение вычислительных методов в химии в планировании и организации эксперимента, обработки экспериментальных данных, прогнозировании структур и свойств молекулярных систем, и механизмов химических реакций.

1.2 Измерение физических величин

Случайная и систематическая ошибки метода анализа. Точность (прецизионность) метода анализа. Воспроизводимость результатов анализа. Источники случайных и систематических ошибок. Абсолютная и относительная ошибки метода анализа. Постоянная, переменная и линейно меняющиеся ошибки метода анализа.

1.3 Эмпирические распределения частот

Обсуждение эмпирических распределений. Одномерное распределение частот. Симметричные и асимметричные распределения частот. Логарифмические распределения частот. Двумерное распределение частот.

Статистические показатели. Средние значения (среднее арифметическое и среднее геометрическое). Срединное значение. Стандартное отклонение. Выборочный размах. Интерквартильный размах. Ассиметрия. Эксцесс.

1.4 Теоретические распределения частот

Гауссово (или нормальное) распределение. Распределение Пуассона. Специальные распределения. Распределение Стьюдента (t-распределение). Распределение Фишера (F-распределение). χ^2 -распределение. t -распределение. Связь между отдельными распределениями

1.5 Характеристика данных анализа

Вычисление и обсуждение доверительного интервала. Принципиальные границы методов анализа. Статистическая оценка качества.

УЭМ 2 Планирование и организация эксперимента

2.1 Введение в теорию планирования и организации эксперимента

Планирование эксперимента и его задачи. Виды экспериментов. Параметры оптимизации и требования, предъявляемые к ним. Факторы и требования к ним. Выбор модели эксперимента. Принятие решений перед планированием эксперимента.

2.2 Статистическая проверка гипотез

Статистические гипотезы. Виды ошибок при выдвижении статистических гипотез. Статистические критерии. Критическая область. Критические точки. Доверительная вероятность (надежность). Алгоритм подтверждения основной гипотезы с помощью критериев согласия. Алгоритм выбора вида критической области. Мощность критерия. Виды критериев согласия и области их применения. χ^2 -критерий согласия Пирсона. F-критерий согласия Фишера. Критерий согласия Бартлетта. Критерий Кохрена. t-критерий Стьюдента. Критерий Романовского. Критерий Колмогорова. Критерий Колмогорова-Смирнова.

2.3 Статистические методы анализа данных и планирования экспериментов

Дисперсионный анализ. Однофакторный дисперсионный анализ с одинаковым числом испытаний на уровнях фактора (ОДА-ОЧИ). Однофакторный дисперсионный анализ при неодинаковом числе испытаний по уровням фактора (ОДА-НЧИ). Корреляционный анализ. Парный выборочный линейный коэффициент корреляции. Корреляционное отношение. Ранговые коэффициенты корреляции. Регрессионный анализ. Оценка значимости уравнения регрессии. Оценка значимости коэффициентов уравнения регрессии.

2.4 Введение в факторные планы

Полный факторный эксперимент типа 2^k . Метод перевода из низшей в более высокую размерность. Метод перемножения. Метод чередования знаков. Полный факторный эксперимент и математическая модель эксперимента.

УЭМ 3 Квантово-химические расчеты молекулярных систем и механизма химических реакций

3.1 Основные положения квантовой химии

Метод Хартри-Фока. Атомные орбитали Хартри-Фока. Атомные орбитали Слейтера-Зенера. Валентно-расщепленный базисный набор. Поляризационный базисный набор. Добавление диффузных функций. Корреляционно-согласованные базисные наборы.

3.2 Метод валентных связей

Волновая функция молекулы. Физический смысл метода валентных связей. Схема метода на примере молекулы водорода.

3.3 Метод молекулярных орбиталей

Физический смысл метода молекулярных орбиталей. Полная волновая функция молекулы. Приближение линейных комбинаций атомных орбиталей.

3.4 Методы теории функционала плотности

Физический смысл метода теории функционала плотности. Многоэлектронная волновая функция молекулы. Теорема Хоэнберга-Кона. Уравнение Кона-Шэма. Метод Хартри-Фока-Слейтера.

3.5 Полуэмпирические методы

Отличия полуэмпирических методов от неэмпирических методов. Преимущества и недостатки полуэмпирических методов. Основные приближения полуэмпирических методов. Метод CNDO. Метод INDO. Методы MINDO. Метод MNDO. Методы AM1. Сравнительная характеристика полуэмпирических методов.

3.6 Метод молекулярной механики

Физический смысл метода молекулярной механики. Простейшая модель молекулярной механики. Методы молекулярной механики (MM+, AMBER, BIO+). Метод неэмпирической молекулярной динамики.

Календарный план, наименование разделов учебного модуля с указанием трудоемкости по видам учебной работы представлены в технологической карте учебного модуля (приложение Б).

4.3 Содержание практических занятий

№ раздела УМ	Наименование практических работ	Трудоемкость, ак. час
1	1. Определение случайных и систематических ошибок. Представление результатов анализа в виде одномерных распределений. Расчет статистических показателей	1
	2. Проверка соответствия эмпирических данных теоретическим распределениям	1
	3. Вычисление доверительного интервала измеряемой величины. Определение принципиальных границ методов анализа. Статистическая оценка качества	1
2	1. Статистическая проверка гипотез	2
	2. Статистические методы анализа данных и планирования экспериментов	2
	3. Введение в факторные планы	2
3	1. Квантово-химические расчеты структуры и свойств молекулярных систем в газовом и конденсированном состоянии	12
	2. Квантово-химические расчеты механизмов химических реакций	6

4.4 Организация изучения учебного модуля

Методические рекомендации по организации изучения УМ с учетом использования в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения учебных занятий даются в Приложении А.

5 Контроль и оценка качества освоения учебного модуля

Контроль качества освоения студентами УМ и его составляющих осуществляется непрерывно в течение всего периода обучения с использованием балльно-рейтинговой системы (БРС), являющейся обязательной к использованию всеми структурными подразделениями университета.

Для оценки качества освоения модуля используются формы контроля: текущий – регулярно в течение всего семестра; рубежный – на девятой неделе семестра; семестровый – по окончании изучения УМ.

Оценка качества освоения модуля осуществляется с использованием фонда оценочных средств, разработанного для данного модуля, по всем формам контроля в соответствии с положением от 25.03.2014 Протокол УС № 18 «Об организации учебного процесса по образовательным программам высшего образования».

Содержание видов контроля и их график отражены в технологической карте учебного модуля (Приложение Б).

6 Учебно-методическое и информационное обеспечение учебного модуля представлено **Картой учебно-методического обеспечения** (Приложение В)

7 Материально-техническое обеспечение учебного модуля

Для проведения лекций необходима аудитория, оборудованная мультимедийной техникой для демонстрации презентаций и видеоматериалов.

Для проведения практических занятий необходим компьютерный класс с современными ПК и установленным на них лицензионным программным обеспечением. На персональных компьютерах должны быть установлены программы для работы с электронными таблицами (Microsoft Excel, OpenOffice Calc, Kingsoft Office Free Spreadsheets или др.) и для выполнения квантово-химических расчетов (Gaussian, GAMESS, HyperChem или др.). Компьютеры должны иметь выход в Интернет.

Приложения (обязательные):

А – Методические рекомендации по организации изучения учебного модуля

Б – Технологическая карта

В – Карта учебно-методического обеспечения УМ

Приложение А

Методические рекомендации по организации изучения учебного модуля «Вычислительные методы в химии»

Методические рекомендации устанавливают порядок и методику изучения теоретического и практического материала учебного модуля. Методические рекомендации составляются по каждому виду учебной работы, включенные в модуль. Методические рекомендации должны нацеливать студента на творческую самостоятельную работу, не должны подменять учебную литературу и справочники, давать готовых решений поставленных перед студентом задач.

Для достижения планируемых результатов обучения, в курсе «Вычислительные методы в химии» используются различные образовательные технологии:

1. *Информационно-развивающие технологии*, направленные на овладение большим запасом знаний, запоминание и свободное оперирование ими. Используется самостоятельное изучение литературы, применение новых информационных технологий для самостоятельного пополнения знаний, включая использование технических и электронных средств информации при освоении дистанционного курса «Вычислительные методы в химии».

2. *Деятельностные практико-ориентированные технологии*, направленные на формирование системы профессиональных практических умений при выполнении практических работ, обеспечивающих возможность качественно выполнять профессиональную деятельность.

3. *Развивающие проблемно-ориентированные технологии*, направленные на формирование и развитие проблемного мышления, мыслительной активности, способности видеть и формулировать проблемы, выбирать способы и средства для их решения. Используются виды проблемного обучения: освещение основных проблем квантово-химических расчетов на лекциях, коллективная мыслительная деятельность в группах при выполнении практических работ, решение задач повышенной сложности.

4. *Личностно-ориентированные технологии обучения*, обеспечивающие в ходе учебного процесса учет различных способностей обучаемых, создание необходимых условий для развития их индивидуальных способностей, развитие активности личности в учебном процессе. Личностно-ориентированные технологии обучения реализуются в результате индивидуального общения преподавателя при выполнении индивидуальных практических работ.

Методические рекомендации по теоретической части учебного модуля

Теоретическая часть модуля направлена на формирование системы знаний в области теории статистических методов анализа экспериментальных данных, планирования, организации и оптимизации химического эксперимента, квантово-химических расчетов. Основное содержание теоретической части излагается преподавателем на лекционных занятиях, а также усваивается студентом при освоении дистанционного курса «Вычислительные методы в химии», который предназначен для более глубокого овладения знаниями основных дидактических единиц учебного модуля.

Методические рекомендации по практическим занятиям

Практические занятия по учебному модулю ставят перед собой цель развивать практические навыки статистической обработки экспериментальных результатов химических и биологических исследований, моделирования и оптимизации химического эксперимента, квантово-химических расчетов молекулярных систем и механизмов химических реакций.

Форма проведения практических и контрольных работ – фронтальная, дистанционная.

Приложение Б

**Технологическая карта
учебного модуля «Вычислительные методы в химии»
семестр 5, ЗЕТ 3, вид аттестации *зачет*, акад.часов 54, баллов рейтинга 150**

№ и наименование раздела учебного модуля, КП/КР	№ недели сем.	Трудоемкость, ак.час					Форма текущего контроля успеv. (в соотв. с паспортом ФОС)	Максим. кол-во баллов рейтинга
		Аудиторные занятия				СРС		
		ЛЕК	ПЗ	ЛР	АСРС			
УЭМ 1 Статистические методы в химии	1-3	6	3		3	9		
1.1 Введение	1	2	1		1	2	T1	25
1.2 Измерение физических величин	2	1				1		
1.3 Эмпирические распределения частот	2	1	1		1	2		
1.4 Теоретические распределения частот	3	1	0,5			1		
1.5 Характеристика данных анализа	3	1	0,5		1	3	ПР1 T2	15 10
УЭМ 2 Планирование и организация эксперимента	4-9	12	6		6	18		
2.1 Введение в теорию планирования и организации эксперимента	4	2	1		1	2		
2.2 Статистическая проверка гипотез	5, 6	4	2		2	4		
2.3 Статистические методы анализа данных и планирования экспериментов	7, 8	4	2		2	6	ПР2	15
2.4 Введение в факторные планы	9	2	1		1	6	T3	10
Рубежная аттестация	1-9	18	9		9	27		75
УЭМ 3 Квантово-химические расчеты молекулярных систем и механизма химических реакций	10-18	9	18		9	27		
3.1 Основные положения квантовой химии	10	1	2		1		ПР3	10
3.2 Метод валентных связей	11, 12	2	4		2		ПР4	10
3.3 Метод молекулярных орбиталей	13, 14	2	4		2		ПР5	10
3.4 Методы теории функционала плотности	15, 16	2	4		2		ПР6	10
3.5 Полуэмпирические методы	17	1	2		1		ПР7	10
3.6 Метод молекулярной механики	18	1	2		1		Р T4	20 5
Итого:	1-18	27	27		18	54		150

В соответствии с Положением «Об организации учебного процесса по образовательным программам высшего образования» перевод баллов рейтинга в традиционную систему оценок осуществляется по шкале:

отлично – 135-150; хорошо – 105-134; удовлетворительно – 75-104; неудовлетворительно – менее 75

Приложение В

Карта учебно-методического обеспечения

Учебного модуля «Вычислительные методы в химии»

Специальность 04.05.01 – фундаментальная и прикладная химия

Формы обучения очная

Курс 3 Семестр 5

Часов: всего 108, лекций 27, практических занятий 27, СРС 54

Обеспечивающая кафедра фундаментальной и прикладной химии

Таблица 1 – Обеспечение учебного модуля учебными изданиями

Библиографическое описание издания (автор, наименование, вид, место и год издания, кол. стр.)	Кол. экз. в библ. НовГУ	Наличие в ЭБС
Учебники и учебные пособия		
1 Годин А.М., Статистика: учебник для вузов / А. М. Годин. – 9-е изд., перераб. и испр. – М.: Издательско-торговая корпорация "Дашков и К", 2011. – 458 с.	4	
2 Цирельсон В.Г., Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для вузов / В. Г. Цирельсон. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. – 496 с.	13	
Учебно-методические издания		
1 Исаков В.А., Рабочая программа учебного модуля «Вычислительные методы в химии» для специальности 04.05.01 фундаментальная и прикладная химия. – Великий Новгород: НовГУ, 2016. – 10 с.		http://www.novsu.ru/study/umk/university/r.1180151.k.sort.spec_shifr/i.1180151/?spec=&showfolder=1222271
2 Даниловских М. Г., Табличный процессор MS-Excel: учеб.-метод. пособие / М. Г. Даниловских, Л. И. Винник; Новгород. гос. ун-т им. Ярослава Мудрого. – Великий Новгород, 2010. – 172 с.	60	

Таблица 2 – Информационное обеспечение учебного модуля

Название программного продукта, интернет-ресурса	Электронный адрес	Примечание
Дистанционный курс «Вычислительные методы в химии» для студентов специальности 04.05.01 фундаментальная и прикладная химия	http://do.novsu.ru/course/view.php?id=527	
Спектральная база данных органических соединений (Spectral Database for Organic Compounds SDBS)	http://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/cre_index.cgi	

Таблица 3 – Дополнительная литература

Библиографическое описание* издания (автор, наименование, вид, место и год издания, кол. стр.)	Кол. экз. в библ. НовГУ	Наличие в ЭБС
1 Грачев Ю. П., Математические методы планирования экспериментов : учеб. пособие для вузов / Ю. П. Грачев, Ю. М. Плаксин. - М. : ДеЛи принт, 2005. - 295 с.	6	
2 Дуброва Т. А., Статистические методы прогнозирования : учеб. пособие для студентов вузов. - М. : ЮНИТИ, 2003. – 206 с.	15	
3 Халафян А. А., Промышленная статистика : Контроль качества, анализ процессов, планирование экспериментов в пакете STATISTICA : учеб. пособие для вузов / А. А. Халафян. - М. : Либроком, 2013. - 380 с.	1	

Действительно для 2017/2018 учебного года. Зав. кафедрой ФПХ И.В. Зыкова
протокол № 11 от 29.06.2017

Действительно для 2018/2019 учебного года. Зав. кафедрой ФПХ И.В. Зыкова
протокол № 13 от 28.06.2018

Действительно для 2019/2020 учебного года. Зав. кафедрой ФПХ И.В. Зыкова
протокол № 11 от 22.06.2019

Действительно для 2020/2021 учебного года
протокол № 11 от 03.07.2020
Зав. кафедр. ФПХ И.В. Зыкова