

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ХИМИИ ДАЛЬНЕВОСТОЧНОГО ОТДЕЛЕНИЯ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИХ ДВО РАН)

УТВЕРЖДАЮ

Директор ИХ ДВО РАН

акад. РАН _____ В.И. Сергиенко

«__» _____ 2015 г.

ПРОГРАММА КУРСА

«КОМПЬЮТЕРНАЯ ХИМИЯ»

Для аспирантов, проходящих обучение по направлению подготовки

04.06.01 - Химические науки

Направленность (профиль) подготовки 02.00.04 физическая

Квалификация (степень) выпускника: **Исследователь. Преподаватель-исследователь**

Форма обучения **очная**

Владивосток 2015 г.

1. Цели и задачи курса

Целями освоения дисциплины «Компьютерная химия» в соответствии с общими целями основной профессиональной образовательной программы послевузовского профессионального образования (аспирантура) являются:

- ознакомление аспирантов с основными направлениями применения компьютерных технологий в химии.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы высшего профессионального образования

Дисциплина «Компьютерная химия» показывает пути оптимизации химического эксперимента, сбора и обработки химической информации, обработки и интерпретации результатов эксперимента.

Для изучения данной дисциплины необходимы «входные» знания, умения, полученные в процессе обучения по программам специалитета или бакалавриата – магистратуры и готовность обучающегося к восприятию знаний и навыков, необходимых при освоении данной дисциплины и приобретенных в результате освоения предшествующих дисциплин. Освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее для выполнения и защиты диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук.

3. Требования к уровню усвоения содержания курса

По окончании изучения указанной дисциплины аспирант должен:

Знать:

основные направления применения компьютерных технологий в химических исследованиях и промышленной химии.

Уметь:

грамотно и эффективно использовать прикладные программные продукты и информационные ресурсы при решении экспериментальных и теоретических проблем в области химии.

Владеть:

навыками применения компьютерных технологий в научных исследованиях, образовании, производственных секторах реальной экономики химического профиля.

4. Система контроля знаний студента

Для контроля усвоения дисциплины учебным планом предусмотрен итоговый зачет с оценкой.

5. Тематический план курса (распределение часов)

Наименование разделов	Количество часов		
	Лекции	Самостоятельная работа	Всего часов
Тема 1. Предмет компьютерной химии	2		2
Тема 2. Химические редакторы и базы данных	4	2	6
Тема 3. Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений	4	4	8
Тема 4. Обработка экспериментальных данных	2	4	6
Тема 5. Компьютеризация измерительной и аналитической аппаратуры.	4	4	8
Тема 6. Компьютерные технологии в обмене научной информацией	2	4	6
Итого по курсу	18	18	36

5.1. Содержание разделов

Тема 1. Предмет компьютерной химии. История ее возникновения. Современный этап развития. Когда и как должна использоваться вычислительная химия.

Тема 2. Химические редакторы и базы данных. Современные основные программные продукты.

Тема 3. Математические методы компьютерного моделирования свойств вещества и химических превращений. Изучение свойств молекул при помощи методов компьютерной химии. Методы квантовой химии и их использование для химического моделирования.

Тема 4. Предварительный (разведочный) анализ. Погрешности прямых и косвенных измерений. Исключение грубых промахов и систематических погрешностей. Построение статистической модели. Статистическая оценка гипотез. Метод наименьших квадратов. Аппроксимация экспериментальных данных непрерывными кривыми. Анализ сложных спектров.

Тема 5. Компьютеризация измерительной и аналитической аппаратуры. Статистическая обработка результатов измерений и принципы проверки научных гипотез и математических моделей. Использование компьютерной анимации, графических и математических продуктов для отображения результатов исследований.

Тема 6. Компьютерные технологии в обмене научной информацией. Основные интернет-ресурсы химического профиля, повышение эффективности доступа к ним. Поиск, хранение и обработка химической информации. Особенности представления химической информации.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины:

а) основная литература:

1. Соловьев М.Е., Соловьев М.М.. Компьютерная химия. - М.: СОЛОН-Пресс, 2005.
2. Степанов Н.Ф.. Квантовая механика и квантовая химия. Учебник. М.: Мир, 2001.
3. Бутырская Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView. –М.: СОЛОН-Пресс, 2011

б) дополнительная литература:

1. Кларк Т. Компьютерная химия. М.: Мир, 1990.
2. Мелёшина А.М. Курс квантовой механики для химиков: Учеб. пособие. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Высш. шк., 1980.
3. Пирсон Р. Правила симметрии в химических реакциях. М.: Мир, 1979.
4. Симкин Б.Я., Клецкий М.Е., Глуховцев М.Н.. Задачи по теории строения молекул. Ростов-Дон: Феникс. 1997.
5. Степанов Н.Ф., Пупышев В.И. Квантовая механика молекул и квантовая химия: Учеб. пособие. М.: Изд-во МГУ, 1991.
6. Фларри Р. Квантовая химия. М.: Мир, 1985.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

1. ISIS Draw. Version 2.4. [Редактор химических формул].
2. ISIS Base. Version 2.4. [Конструктор химических баз данных].

3. <http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html>

Программу разработал

к.х.н., с.н.с.

Голиков А.П.