

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ



УТВЕРЖДАЮ:

проректор по научно-методической
и учебной работе

Е.И. Скафа

апреля 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

«КОМПЬЮТЕРНАЯ СТРУКТУРНАЯ ХИМИЯ»

Направление подготовки:	04.04.01 Химия
Магистерская программа:	химия
Образовательная программа:	академическая магистратура
Квалификация:	магистр
Форма обучения:	<u>очная</u> , очно-заочная, заочная

Донецк 2020

УТВЕРЖДАЮ:

Декан химического факультета

А.В. Белый

«16» апреля 2020 г.



Программа составлена на основании Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования (ФГОС ВО) направления подготовки 04.04.01 Химия, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации № 655 от 13 июля 2017 г.;

Порядка организации учебного процесса в образовательных организациях высшего профессионального образования Донецкой Народной Республики, утвержденного приказом Министерства образования и науки ДНР № 1171 от «10» ноября 2017 г.;

учебного плана и основной образовательной программы высшего профессионального образования направления подготовки 04.04.01 Химия, разработанных в ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет».

Разработчик:

Доцент кафедры физической химии,
к.х.н., доцент

Н.А. Туровский

Программа учебной дисциплины утверждена на заседании кафедры физической химии

Протокол № 13 от «28» марта 2020 г.

Заведующий кафедрой

В.М. Михальчук

Программа учебной дисциплины одобрена учебно-методической комиссией химического факультета

Протокол № 3 от «15» апреля 2020 г.

Председатель учебно-методической
комиссии факультета

Н.В. Яблочкова

1. ОБЛАСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ И МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ

Дисциплина «Компьютерная структурная химия» относится к вариативной части (Б1.В.ОД.3) учебного плана по направлению подготовки 04.04.01 Химия (магистерская программа Химия). Дисциплина реализуется на химическом факультете кафедрой физической химии. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими и сопутствующими дисциплинами: неорганическая, органическая, физическая химия. Дисциплина «Компьютерная структурная химия» является основой для прохождения научной практики и выполнения выпускной работы магистра. Химик, после изучения данной дисциплины, должен обладать способностями и умениями самостоятельно добывать знания из различных источников, систематизировать полученную структурную информацию. Формирование такого умения происходит за счет участия обучающихся в занятиях, выполнения контрольных заданий и тестов, выполнения лабораторных работ, написания курсовых и выпускных квалификационных работ. При этом самостоятельная работа студентов играет решающую роль в ходе всего учебного процесса.

2. СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

<i>Характеристика учебной дисциплины</i>		
Направление подготовки	04.04.01 Химия	
Магистерская программа	Химия	
Образовательная программа	академическая магистратура	
Квалификация	магистр	
Количество содержательных модулей	1	
Дисциплина базовой / вариативной части образовательной программы	вариативная часть	
Формы контроля (МК, экзамен, зачет)	1 модульный контроль, 1 экзамен	
Показатели	очная форма обучения	заочная форма обучения
Количество зачетных единиц (кредитов)	3	
Год подготовки	1	
Семестр	3	
Количество часов	108	
- лекционных	12	
- практических, семинарских	-	
- лабораторных	12	
- самостоятельной работы	84	
в т.ч. индивидуальное задание	-	
Недельное количество часов,	9	
в т.ч. аудиторных	2	

3. ОПИСАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели и задачи

Цель изучения дисциплины «Компьютерная структурная химия» – формирование у студентов систематических знаний современного состояния, возможностей и ограничений технологий компьютерного синтеза, распознавания структуры химических соединений, структурной химии, молекулярного моделирования, QSAR и докинга молекулярных систем.

Задачи дисциплины:

- формирование практических навыков и умений применения научных методов, а также разработки программы методики проведения научного исследования;
- воспитание нравственных качеств, привитие этических норм в процессе осуществления научного исследования;
- подготовить специалиста-химика, который, опираясь на основные концепции атомно-молекулярной архитектуры и электронной структуры молекулярного уровня организации вещества, будет использовать методы компьютерной химии, как средство получения химической информации о строении и свойствах химических соединений;
- сформировать базовые представления о теоретических методах, которыми изучают электронное строение атомов и молекул; для получения информации о строении и реакционной способности молекул;
- научить студентов использовать методы квантовой химии, современные комплексы программ структурной химии для проведения квантово-химических расчетов.

Требования к результатам освоения дисциплины: Процесс изучения дисциплины «Компьютерная структурная химия» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО РФ направления подготовки 04.04.01 Химия и основной образовательной программы высшего профессионального образования направления подготовки 04.04.01 Химия (магистерская программа: химия):

универсальные компетенции:

- способность осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий (УК-1);
- способность управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла (УК-2);
- способность организовывать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной цели (УК-3);
- способность применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранных языках, для академического и профессионального взаимодействия (УК-4);
- способность анализировать и учитывать разнообразие культур в процессе межкультурного взаимодействия (УК-5);
- способность определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки (УК-6).

общепрофессиональные компетенции:

- способность выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения (ОПК-1);
- способность анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук (ОПК-2);
- способность использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности (ОПК-3);
- способность готовить публикации, участвовать в профессиональных дискуссиях, представлять результаты профессиональной деятельности в виде научных и научно-популярных докладов (ОПК-4).

профессиональные компетенции, соответствующие виду (видам) профессиональной деятельности, на которые ориентирована программа магистратуры:

научно-исследовательская деятельность:

- способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты (ПК-1);
- владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии (ПК-2);
- готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований (ПК-3);

- способностью участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати) (ПК-4);

организационно-управленческая деятельность:

- владением навыками составления планов, программ, проектов и других директивных документов (ПК-5);

- способностью определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения, брать на себя ответственность за результат деятельности (ПК-6);

научно-педагогическая деятельность:

- владением методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования (ПК-7).

В результате изучения учебной дисциплины студент должен:

знать:

- методологию молекулярного моделирования;
- QSAR/QSPR методологию в компьютерном дизайне биологически/реакционно активных веществ;
- методологию установления структуры химических соединений спектральными методами;
- методологию физико-химических основ компьютерного синтеза;
- методологию установления структуры химических соединений спектральными методами;
- методологию выбора уровня теории молекулярного моделирования методами квантовой химии;
- методологию выбора уровня теории молекулярного моделирования методами квантовой химии;
- закономерностей связи электронного строения химических соединений с их свойствами и реакционной способностью.

уметь:

- получать структурно-химическую информацию – молекулярные дескрипторы исследуемых объектов используя комплексы программ структурной химии: HyperChem, MORAC, GAUSSIAN 09, GAMESS;
- определить равновесную структуру;
- провести конформационный анализ;
- рассчитать энергию ионизации в вертикальном и адиабатическом приближении, а также по теореме Купманса;
- рассчитать энергию диссоциации химических соединений на ионы или радикалы;
- рассчитать дипольные моменты и использовать их для обоснования результатов конформационного анализа;
- анализировать полученные результаты, опираясь на знания концепций структурной химии;
- использовать программы структурной химии для решения химических задач;
- осуществить поиск необходимых физико-химических данных в электронных источниках научной химической информации;
- применять свои знания на практике и владеть навыками работы на современных компьютерных системах;
- провести и обосновать выбор метода структурной химии, который необходим для решения поставленной задачи;
- *ориентироваться* в круге основных проблем современных актуальных направлений физической химии.

владеть:

- навыками применения основных методологий актуальных направлений физической химии современными методами научного исследования в предметной сфере;
- навыками управления научным коллективом;
- навыками совершенствования и развития своего научного потенциала.

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ И ФОРМЫ ОРГАНИЗАЦИИ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Порядковый номер и наименование темы	Краткое содержание темы
<i>Содержательный модуль 1</i>	
Тема 1. QSAR/ QSPR методология исследования виртуального молекулярного мира.	Метод, методика и методология научных исследований <i>insilico</i> . QSAR/QSPR методология прогноза структуры и свойств химических соединений. Прямая и обратная задачи QSAR/QSPR. Молекулярные дескрипторы: Ван-дер-Ваальсовый (собственный) объем химических частиц. Энергия граничных МО. Молекулярная жесткость. Электронная плотность. HyperChem генератор дескрипторов молекулярной структуры.
Тема 2. Методология компьютерного синтеза	Ретросинтетический компьютерный синтез. Ретросинтетический неконвергентный компьютерный синтез. Ретросинтетический конвергентный компьютерный синтез. Методология эмпирического компьютерного синтеза. Методология неэмпирического компьютерного синтеза. Методология прямого компьютерного синтеза
Тема 3. Компьютерная спектרוструктурная химия	Методология установления молекулярной структуры методами спектроскопии. Спектроскопия и спектרוструктурная информация. Спектרוструктурные эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с электромагнитным излучением: радиоволновым; микроволновым; инфракрасным; ультрафиолетовым. рентгеновским. Необходимое и достаточное условие появления полосы в инфракрасном спектре химических частиц. Спектרוструктурные информационно-поисковые системы структурной химии. Спектרוструктурные экспертные системы структурной химии. Спектרוструктурный безэталонный анализ структурной химии.
Тема 4. Компьютерная супрамолекулярная химия.	Супрамолекулярный механизм химических реакций. Супрамолекулярные реакции. Супрамолекулярные каталитические реакции. Химическая активация реагентов супрамолекулярных реакций. Кинетическая стабильность интермедиатов супрамолекулярных реакций. Термодинамическая стабильность интермедиатов супрамолекулярных реакций. Стереохимическая комплементарность молекулярной информации реагентов. Динамическая комплементарность молекулярной информации реагентов. Принцип двойной комплементарности молекулярной информации реагентов. Молекулярный докинг реагентов. Источники энергии для химической активации реагентов, их энергетика. Супрамолекулярные взаимодей-

	<p>ствия: Ион-ионные взаимодействия. Ион-дипольные взаимодействия. Диполь-дипольные взаимодействия. Катион-π-взаимодействия. π -π-Стэкинг-взаимодействия. Н - взаимодействия реагентов: Ассоциаты янус-молекул Энергия Н – связи. Профили ППЭ Н – ассоциатов. Длина Н – связи. Условие Гамильтона - Айберса для Н-ассоциатов. Изменение длины связи $\sim X-H\cdots$ в Н-ассоциатах. Конфигурация фрагмента $\sim X-H\cdots Y$ в Н-ассоциатах. Изменение заряда мостикового атома водорода в Н-ассоциатах. ИК- спектральные особенности Н- ассоциатов. Дипольный момент Н-ассоциатов. Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия и их классификация. Ориентационные Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия реагентов. Индукционные Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия реагентов. Дисперсионные Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия реагентов.</p>
<p>Тема 5. Методология конформационного анализа <i>insilico</i></p>	<p>Актуальные задачи современной химии виртуального молекулярного мира. Молекулярная структура в приближении статической и динамической модели. Методологические проблемы конформационного анализа химических соединений <i>insilico</i>. Методология установления равновесной структуры химических частиц вещества. Методология компьютерного конформационного анализа химических соединений. Поверхность потенциальной энергии: число конформеров в конформационной смеси и барьеры внутреннего вращения. Методология анализа состава равновесной смеси конформеров методами компьютерной структурной химии. Методология анализа состава смеси конформеров методами спектруктурной химии. Модель «серый ящик». Модель «белый ящик». Модель «черный ящик».</p>
<p>Тема 6. Ионизация и поляризация химических соединений <i>insilico</i>.</p>	<p>Молекулярное моделирование эффекта ионизации химических соединений Процесс вертикальной и адиабатической ионизации химических частиц. Принцип Франка - Кондона. Методология определения потенциалов ионизации химических соединений методами компьютерной структурной химии: орбитальный потенциал ионизации; вертикальный потенциал ионизации; адиабатический потенциал ионизации. Методология определения энергии сродства к электрону химических соединений методами компьютерной структурной химии: энергия орбитального сродства к электрону; энергия вертикальноно сродства к электрону; энергия адиабатического сродства к электрону Методология определения потенциалов ионизации методом фотоэлектронной спектроскопии. Эффекты структурной поляризация химических соединений -постоянный электрический дипольный момент; индуцированный дипольный момент; мгновенный дипольный момент. Методология квантовохимического расчета дипольных моментов химических соединений</p>
<p>Тема 7. Компьютерные информаци-</p>	<p>Gaussian, Gamessi Природа информационные технологии компьютерной структурной химии. HyperChem и MOPE-</p>

онные технологии структурной химии	Синформационные технологии компьютерной структурной химии. <i>ChemCraft</i> - информационные технологии компьютерной структурной химии.
------------------------------------	---

Тематический план

Содержательный модуль 1						
Названия содержательных модулей и тем	Количество часов					
	Очная форма обучения					
	всего	в т.ч.				
		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа
Тема 1. QSAR/ QSPR методология исследования виртуального молекулярного мира.	18	2		2	14	
Тема 2. Методология компьютерного синтеза	16	2			14	
Тема 3. Компьютерная спектроскопическая химия	18	2		2	14	
Тема 4. Компьютерная супрамолекулярная химия.	15	2		2	11	
Тема 5. Методология конформационного анализа <i>insilico</i>	15	2		2	11	
Тема 6. Ионизация и поляризация химических соединений <i>insilico</i> .	14	2		2	10	
Тема 7. Компьютерные информационные технологии структурной химии	12			2	10	
Итого <i>по содержательному модулю 1</i>	108	12	-	12	84	

5. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ЛЕКЦИОННЫХ, ПРАКТИЧЕСКИХ И ЛАБОРАТОРНЫХ ЗАНЯТИЙ

Практические занятия не предусмотрены учебным планом

ТЕМЫ ЛЕКЦИОННЫХ ЗАНЯТИЙ

№ п/п	Название темы	Количество часов
1	QSAR/ QSPR методология исследования виртуального молекулярного мира.	2

2	Методология компьютерного синтеза	2
3	Компьютерная спектроскопическая химия	2
4	Компьютерная супрамолекулярная химия.	2
5	Методология конформационного анализа <i>insilico</i>	2
6	Ионизация и поляризация химических соединений <i>insilico</i> .	2
	ВСЕГО	12

ТЕМЫ ЛАБОРАТОРНЫХ ЗАНЯТИЙ

№ п/п	Название темы	Количество часов
1.	QSAR методология компьютерной структурной химии.	2
2.	Методология определения статической и динамической молекулярной структуры химических соединений методами структурной химии.	2
3.	Моделирование супрамолекулярных наночастиц и нано-молекул.	2
4.	Молекулярное моделирование супрамолекулярных систем.	2
5.	Методология конформационного анализа химических соединений.	2
6.	Энергия ионизации химических соединений: потенциалы ионизации.	2
	ВСЕГО	12

6. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ОРГАНИЗАЦИИ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ.

ОРГАНИЗАЦИЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

№ п/п	Название темы	Количество часов
1.	QSAR/ QSPR методология исследования виртуального молекулярного мира.	7
	Индивидуальная работа (п. 1)	7
2.	Методология компьютерного синтеза.	7
	Индивидуальная работа (п. 2)	7
3.	Компьютерная спектроскопическая химия	7
	Индивидуальная работа (п. 3)	7
4.	Компьютерная супрамолекулярная химия.	6
	Индивидуальная работа (п. 4)	5
5.	Методология конформационного анализа <i>insilico</i>	6
	Индивидуальная работа (п. 5)	5
6.	Ионизация и поляризация химических соединений <i>insilico</i> .	5
	Индивидуальная работа (п. 6)	5
7.	Компьютерные информационные технологии структурной химии	5

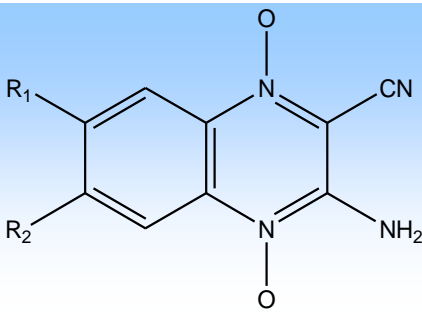
8.	Индивидуальная работа (п. 7)	5
	ВСЕГО	84

7. ИНДИВИДУАЛЬНЫЕ ЗАДАНИЯ

Индивидуальная работа

Цель: овладеть теорией и практикой компьютерной структурной химии.

1 Выполнить квантово-химический расчет структурных параметров объектов данного ряда.

N		R ₁	R ₂	C _{1%}	HCR	E _{pc}
1		H	H	30	80	-0.88
2		CH ₃	CH ₃	-	-	-0.97
3		F	H	15	100	-0.75
4		CF ₃	H	7	75	-0.65
5		CF ₃ O	H	-	-	-0.73
6		Cl	H	9	150	-0.74
7		Cl	Cl	1	80	-0.62
8		CN	H	11	50	-0.56
9		F	F	1	10	-0.75
10		Cl	F	2	10	-0.68

C_{1%} – концентрация активного вещества, необходимая для выживания 1% исследуемых клеток. HCR – соотношение цитотоксичности, определяемое как отношение между дозой в воздухе и дозой в гипоксии, необходимое для продуцирования гибели 99% клеток ткани. E_{pc} – первый потенциал восстановления, измеренный методом циклической вольтамперометрии в диметилформамиде.

Построить графики зависимости свойств исследуемого ряда соединений в координатах.

Серия 1	Серия 2	Серия 3
1. C _{1%} = f(ΔH _f ^o),	1. HCR = f(ΔH _f ^o),	1. E _{pc} = f(ΔH _f ^o),
2. C _{1%} = f(E _{B3MO}),	2. HCR = f(E _{B3MO}),	2. E _{pc} = f(E _{B3MO}),
3. C _{1%} = f(G ^o),	3. HCR = f(G ^o),	3. E _{pc} = f(G ^o),
4. C _{1%} = f(v(N=O)),	4. HCR = f(v(N=O)),	4. E _{pc} = f(v(N=O)),
5. C _{1%} = f(V _{VDW}),	5. HCR = f(V _{VDW}),	5. E _{pc} = f(V _{VDW}),
6. C _{1%} = f(logP),	6. HCR = f(logP),	6. E _{pc} = f(logP),
7. C _{1%} = f(α).	7. HCR = f(α).	7. E _{pc} = f(α).

С помощью полученных математических выражений, связывающих свойства исследуемого ряда объектов, оцените отсутствующие экспериментальные величины потенциала и HCR для соединений 2 и 5. На основе полученных данных попытайтесь предсказать их активность как цитотоксических агентов. Сравните с величинами, полученными в задании.

2. Разработать блок-схему виртуального ретросинтетического неэмпирического синтеза целевого вещества специального назначения.

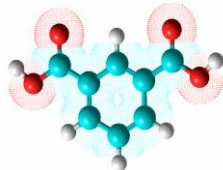
3. Освоить методологию определения [параметров](#) статической и динамической молекулярной структуры химических соединений методами квантовой химии, которые реализованы в комплексе программ структурной химии HyperChem. Определить молекулярную структуру равновесного состояния конформаций R₁, R₂ – производных фталевой кислоты при 298,15K.

4. Используя методику 2D-докирования построить линейные и циклические супрамолекулярные наночастицы изо-фталевой кислоты.

5. Провести конформационный анализ производных изо-фталевой кислоты. Определить барьеры внутреннего вращения он связи, скорость превращения конформеров и состав конформационной смеси.

6. Определить орбитальный, вертикальный и адиабатический потенциал ионизации производных фталевых кислот.

Объекты для индивидуальной работы

 R	Задание	-R ₁	Задание	-R ₁
	1.	H	6	-CH ₃
	2.	-Cl	7	-OCH ₃
	3.	-NO ₂	8	-CH ₂ Cl
	4.	-OH	9	-CHCl ₂
	5.	-SH	10	-CCl ₃

7. Gaussian и Gamess информационные технологии компьютерной структурной химии. Их возможности и ограничения. Методология расчета ИК спектров и термодинамических величин молекулярных и супрамолекулярных наночастиц.

8. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ К ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ.

- 1 Компьютерный молекулярный дизайн лекарственных препаратов.
- 2 Что такое QSAR/QSPR.
- 3 3D-QSAR/QSPR методы.
- 4 Прямая и обратная задачи QSAR/QSPR.
- 5 Методология QSAR/QSPR.
- 6 Классификация дескрипторов молекулярной структуры QSAR/QSPR.
- 7 Дескрипторы молекулярной структуры элементного уровня.
- 8 Дескрипторы гидрофобности химических соединений в QSAR/QSPR и 3D-HyperChem генератор дескрипторов молекулярной структуры.
- 9 HyperChem генератор дескрипторов молекулярной структуры.
- 10 Методология компьютерного синтеза.
- 11 Ретросинтетический компьютерный синтез.
- 12 Эмпирический компьютерный синтез.
- 13 Неэмпирический компьютерный синтез.
- 14 GAUSSIAN - информационные технологии компьютерной структурной химии.

9. ОБРАЗЕЦ ВАРИАНТА МОДУЛЬНОГО КОНТРОЛЯ И КРИТЕРИЙ ОЦЕНИВАНИЯ

**ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Химический факультет**

Направление подготовки:	04.04.01 Химия
Магистерская программа:	химия
Программа подготовки:	академическая магистратура
Семестр	3
Учебная дисциплина	Компьютерная структурная химия

**МОДУЛЬНАЯ КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА
ВАРИАНТ №1**

1. Эмпирический компьютерный синтез.
2. Неэмпирический компьютерный синтез.
3. GAUSSIAN - информационные технологии компьютерной структурной химии.

. Утверждено на заседании кафедры физической химии,
протокол № ____ от « ____ » _____ 20 ____ г.

Зав. кафедрой _____
 Преподаватель _____

Критерии оценивания модульного контроля

Номер задания	Количество баллов
Задание 1	10
Задание 2	10
Задание 3	10
Всего	30

9. ОБРАЗЕЦ ЭКЗАМЕНАЦИОННОГО БИЛЕТА

(теоретические вопросы к экзамену, образец билета и критерии оценивания)

Теоретические вопросы к экзамену

1. Методологические основы научных исследований insilico.
2. Актуальные задачи современной химии виртуального молекулярного мира
3. **QSAR/QSPR методология прогноза структуры и свойств химических соединений.**
4. Прямая и обратная задачи QSAR/QSPR.
5. Молекулярные дескрипторы: Ван-дер-Ваальсовый (собственный) объем химических частиц; энергия граничных МО; молекулярная жесткость; электронная плотность.
6. HyperChem генератор дескрипторов молекулярной структуры.
7. Методология компьютерного синтеза.
8. Ретросинтетический компьютерный синтез.
9. Ретросинтетический неконвергентный компьютерный синтез.
10. Ретросинтетический конвергентный компьютерный синтез.
11. Методология эмпирического компьютерного синтеза.
12. Методология неэмпирического компьютерного синтеза.
13. Методология прямого компьютерного синтеза.
14. Компьютерная спектроскопическая химия.
15. **Методология установления молекулярной структуры методами спектроскопии**
16. Спектроскопия и спектроскопическая информация.
17. Спектроскопические эффекты химических частиц вещества при взаимодействии с электромагнитным излучением: радиоволновым; микроволновым; инфракрасным; ультрафиолетовым и рентгеновским.
18. Необходимое и достаточное условие появления полосы в инфракрасном спектре химических частиц.
19. Спектроскопические информационно-поисковые системы структурной химии.
20. Спектроскопические экспертные системы структурной химии.
21. Спектроскопический безэталонный анализ структурной химии.
22. **Компьютерная супрамолекулярная химия. Супрамолекулярный механизм химических реакций.**
23. Супрамолекулярные реакции.
24. Супрамолекулярные каталитические реакции.
25. Химическая активация реагентов супрамолекулярных реакций.
26. Кинетическая стабильность интермедиатов супрамолекулярных реакций.
27. Термодинамическая стабильность интермедиатов супрамолекулярных реакций.
28. Стереохимическая комплементарность молекулярной информации реагентов.

29. Динамическая комплементарность молекулярной информации реактантов.
30. Принцип двойной комплементарности молекулярной информации реактантов.
31. Молекулярный докинг реактантов.
32. Источники энергии для химической активации реактантов, их энергетика.
33. Супрамолекулярные взаимодействия:
34. Ион-ионные взаимодействия.
35. Ион-дипольные взаимодействия.
36. Диполь-дипольные взаимодействия.
37. Катион- π -взаимодействия.
38. π - π -Стэкинг-взаимодействия.
39. Н - взаимодействия реактантов: ассоциаты янус-молекул; энергия Н – связи; профили ППЭ Н – ассоциатов; длина Н – связи; условие Гамильтона - Айберса для Н-ассоциатов; изменение длины связи $\sim X-H \dots$ в Н-ассоциатах; конфигурация фрагмента $\sim X-H \dots Y \sim$ в Н-ассоциатах; изменение заряда мостикового атома водорода в Н-ассоциатах; ИК- спектральные особенности Н- ассоциатов ; дипольный момент Н-ассоциатов.
40. Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия и их классификация.
41. Ориентационные Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия реактантов.
42. Индукционные Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия реактантов.
43. Дисперсионные Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия реактантов
44. Методология конформационного анализа *insilico*.
45. Молекулярная структура в приближении статической и динамической модели.
46. Методологические проблемы конформационного анализа химических соединений *insilico*.
47. Методология установления равновесной структуры химических частиц вещества.
48. Методология компьютерного конформационного анализа химических соединений.
49. Поверхность потенциальной энергии: число конформеров в конформационной смеси и барьеры внутреннего вращения.
50. Методология анализа состава равновесной смеси конформеров методами компьютерной структурной химии.
51. Методология анализа состава смеси конформеров методами спектроскопической химии.
52. Ионизация и поляризация химических соединений *insilico*.
53. Молекулярное моделирование эффекта ионизации химических соединений.
54. Процесс вертикальной и адиабатической ионизации химических частиц. Принцип Франка - Кондона.
55. Методология определения потенциалов ионизации химических соединений методами компьютерной структурной химии: обитальный потенциал ионизации; вертикальный потенциал ионизации; адиабатический потенциал ионизации.
56. Методология определения энергии сродства к электрону химических соединений методами компьютерной структурной химии: энергия орбитального сродства к электрону; энергия вертикального сродства к электрону; энергия адиабатического сродства к электрону
57. Методология определения потенциалов ионизации методом фотоэлектронной спектроскопии.
58. Эффекты структурной поляризации химических соединений: постоянный электрический дипольный момент; индуцированный дипольный момент; мгновенный дипольный момент.
59. Методология квантовохимического расчета дипольных моментов химических соединений.
60. Компьютерные информационные технологии структурной химии.
61. GAUSSIAN - информационные технологии компьютерной структурной химии.

62. GAMESS-информационные технологии компьютерной структурной химии.
63. HyperChem - информационные технологии компьютерной структурной химии.
64. MOPAC – информационные технологии компьютерной структурной химии.
65. ChemCraft - информационные технологии компьютерной структурной химии.

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Химический факультет

Направление подготовки:	04.04.01 Химия
Магистерская программа:	химия
Программа подготовки	академическая магистратура
Семестр	3
Учебная дисциплина	Компьютерная структурная химия

БИЛЕТ №1

1. HyperChem - информационные технологии компьютерной структурной химии.
2. MOPAC – информационные технологии компьютерной структурной химии.
3. ChemCraft - информационные технологии компьютерной структурной химии.
4. Методология определения потенциалов ионизации методом фотоэлектронной спектроскопии.
5. Эффекты структурной поляризации химических соединений: постоянный электрический дипольный момент; индуцированный дипольный момент; мгновенный дипольный момент.

Утверждено на заседании кафедры физической химии.

Протокол № ____ от «__» _____ 20__ года

Заведующий кафедрой _____

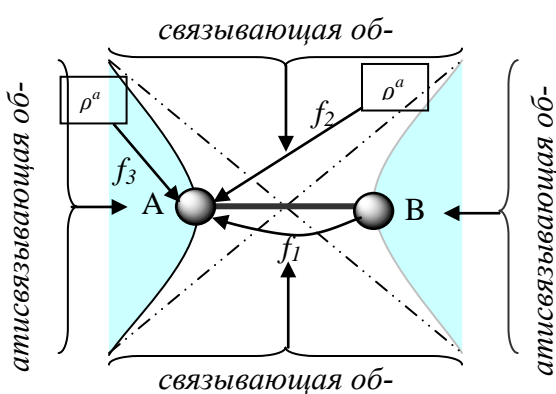
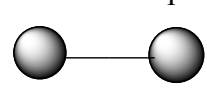
Экзаменатор _____

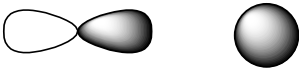
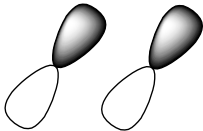
Критерии оценивания экзамена

Номер задания	Количество баллов
Задание 1	25
Задание 2	М
Задание 3	М
Задание 4	М
Задание 5	М
Всего	100

11. ОБРАЗЕЦ ТЕСТОВОГО ЗАДАНИЯ

В приведенных тестах укажите правильный ответ (правильных вариантов ответа один или несколько).

1.	 <p>Граничная поверхность, которая разделяет связывающую и антисвязывающую области, определяется условием:</p> <ul style="list-style-type: none"> а. $f_2 = f_1 + f_3$; б. $f_2 = f_3$; в. $f_1 + f_2 + f_3 = 0$. 	
2.	<p>Проанализировать структуру МО (ψ_1)</p> $\psi_1 = \dots + c_{11}\phi_{S(A)} + c_{12}\phi_{S(B)} + \dots$ <p>и определить тип вклада в образование химической связи s – АО, которые центрированы на атомах А и В.</p> <ul style="list-style-type: none"> а. связывающий вклад; б. антисвязывающий вклад. в. несвязывающий вклад. 	
3.	<p>Проанализировать структуру МО (ψ_2)</p> $\psi_2 = \dots - c_{21}\phi_{Px(A)} + c_{22}\phi_{Px(B)} + \dots$ <p>и определить тип вклада в образование σ-химической связи p – АО, которые центрированы на атомах А и В.</p> <ul style="list-style-type: none"> а. связывающий вклад; б. антисвязывающий вклад; в. несвязывающий вклад. 	
4.	<p>Проанализировать структуру МО (ψ_2)</p> $\psi_2 = \dots - c_{21}\phi_{Px(A)} + c_{22}\phi_{Px(B)} + \dots$ <p>и определить тип вклада p – АО, которые центрированы на атомах А и В, в образование π-химической связи.</p> <ul style="list-style-type: none"> а. связывающий вклад; б. антисвязывающий вклад; в. Несвязывающий вклад. 	
5.	<p>Проанализировать структуру МО (ψ_1)</p> $\psi_1 = \dots + c_{11}\phi_{S(A)} + c_{12}\phi_{Px(B)} + \dots$ <p>и определить тип вклада s и p – АО, которые центрированы на атомах А и В, в образование химической связи.</p> <ul style="list-style-type: none"> а. связывающий вклад; б. антисвязывающий вклад; в. несвязывающий вклад. 	
6.	<p>S АО центрированы на атомах А и В и образуют ... комбинацию.</p>  <p>Выбрать компоненты $c_{21}\phi_{S(A)}$ и $c_{22}\phi_{S(B)}$ МО контролирующей эту хими-</p>	

	<p>ческую связь:</p> $\Psi_2 = \dots c_{21}\varphi_{S(A)} \dots c_{22}\varphi_{S(B)} +$ <p>а. связывающую; б. антисвязывающую; в. несвязывающую. г. $-c_{21}\varphi_{S(A)}$; д. $+c_{21}\varphi_{S(A)}$; е. $-c_{22}\varphi_{S(B)}$; ж. $+c_{22}\varphi_{S(B)}$.</p>	
7.	<p>p_x и S АО центрированы на атомах А и В и образуют ... комбинацию</p>  <p>Выбрать компоненты $c_{21}\varphi_{p_x(A)}$ и $c_{22}\varphi_{p_x(B)}$ МО контролирующей эту химическую связь:</p> $\Psi_2 = \dots c_{21}\varphi_{p_x(A)} \dots c_{22}\varphi_{S(B)} +$ <p>а. связывающую; б. антисвязывающую; в. несвязывающую. г. $-c_{21}\varphi_{p_x(A)}$; д. $+c_{21}\varphi_{p_x(A)}$; е. $-c_{22}\varphi_{S(B)}$; ж. $+c_{22}\varphi_{S(B)}$.</p>	
8.	<p>p_z АО центрированы на атомах А и В и образуют ... π-комбинацию</p>  <p>Выбрать компоненты $c_{21}\varphi_{p_z(A)}$ и $c_{22}\varphi_{p_z(B)}$ МО контролирующей эту химическую связь:</p> $\Psi_2 = \dots c_{21}\varphi_{p_z(A)} \dots c_{22}\varphi_{p_z(B)} +$ <p>а. связывающую; б. антисвязывающую; в. несвязывающую. г. $-c_{21}\varphi_{p_z(A)}$; д. $+c_{21}\varphi_{p_z(A)}$; е. $-c_{22}\varphi_{p_z(B)}$; ж. $+c_{22}\varphi_{p_z(B)}$.</p>	
9.	<p>Энергия резонансного орбитального взаимодействия атомов А и В вычисляется по выражению:</p> <p>а. $E_{AB}^k = -\frac{1}{2} \gamma_{AB} \sum_{i=1}^{ACI} \sum_{\mu=1}^{n_A} \sum_{\nu=1}^{m_B} (C_{i\mu} C_{i\nu})^2$;</p> <p>б. $E_{AB}^J = 2 \sum_{i=1}^{B3MO} \sum_{\mu=1}^{nA} \sum_{\nu=1}^{nB} c_{i\mu} c_{i\nu} S_{\mu\nu} \beta_{\mu\nu}$;</p>	

	<p>В. $E_{AB}^{E,N} = -(Q_A \times Z_B + Q_B Z_A) \gamma_{AB};$</p> <p>Г. $E_{AB}^{E,E} = Q_A \times Q_B \times \gamma_{AB};$</p> <p>Д. $E_{AB}^{N,N} = Z_A \times Z_B \times \gamma_{AB}$</p>	
10.	<p>Соотношение электростатической теоремы Гельмага-Фейнмана:</p> <p>а. $\frac{\partial E_n(\lambda)}{\partial \lambda} = \int \Psi^*(\lambda) \frac{\partial \hat{H}(\lambda)}{\partial \lambda} \Psi(\lambda) d\tau$</p> <p>б. $2T + V = 0$</p> <p>в. $2T + V + Rab \frac{d\varepsilon(Rab)}{dRab} = 0$</p> <p>г. $f_a = \sum_b \frac{Z_a Z_b}{R_{ab}^2} - Z_a \int \frac{\rho(r_a)}{r_a^2} dV$</p>	

12. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ

По курсу предполагается проведение промежуточной аттестации в виде модульного контроля, и экзамена. Экзамен сдают студенты с целью повышения рейтинга.

Распределение баллов, которые могут получить студенты в процессе изучения дисциплины

Организационно учебная работа студента	СРС			Всего
	Индивидуальная работа	Модульный контроль	Индивидуальная творческая работа	
Max 50 баллов	max 10 баллов	max 40 баллов		100 баллов

Шкала соответствия баллов национальной шкале

Оценка по шкале ECTS	Оценка по 100-балльной шкале	Оценка по государственной шкале (экзамен, дифференцированный зачет)	Оценка по государственной шкале (зачет)
A	90-100	5 (отлично)	зачтено
B	80-89	4 (хорошо)	зачтено
C	75-79	4 (хорошо)	зачтено
D	70-74	3 (удовлетворительно)	зачтено
E	60-69	3 (удовлетворительно)	зачтено
FX	35-59	2 (неудовлетворительно) с возможностью повторной сдачи	не зачтено
F	0-34	2 (неудовлетворительно) с возможностью повторной сдачи при условии обязательного набора дополнительных баллов	не зачтено

13. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Лекционные занятия проводятся в аудитории, оснащенной мультимедийной техникой и доской. Лабораторные занятия проводятся в компьютерном классе, оборудованном компьютерами с лицензионным программным обеспечением, доступом к сети Интернет, столами, дос-

кой. Дополнительное обеспечение: Wi-Fi доступ в корпусах университета, текстовые и электронные ресурсы Научной библиотеки университета

14. РЕКОМЕНДОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

№	Наименование	Кол-во экземпляров в библиотеке ДонНУ	Наличие электронной версии в ЭБС
Основная			
1.	Туровський, М.А. Комп'ютерна структурна хімія [Електронний ресурс]: навч. посібник / М.А. Туровський, О.М. Пастернак; Донецький нац. ун-т. – Донецьк: ДонНУ, 2009. / Туровский, Н.А. Компьютерная структурная химия [Электронный ресурс]: учебное пособие / Н.А. Туровский, Е.Н. Пастернак; Донецкий нац. ун-т. – Донецьк : ДонНУ, 2009.	Электронный ресурс	+
2.	Туровський, М.А. Комп'ютерна структурна хімія [Текст]: навч. посібник / М.А. Туровський, О.М. Пастернак; Донецький нац. ун-т. – Донецьк: ДонНУ, 2009. – 153 с. / Туровский, Н.А. Компьютерная структурная химия [Текст]: учебное пособие / Н.А. Туровский, Е.Н. Пастернак; Донецкий нац. ун-т. – Донецьк: ДонНУ, 2009. – 153 с.	17	
3.	Туровский Н.А. Практикум компьютерной структурной химии: учебное пособие /Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с	10	
4.	Туровский Н.А. Практикум компьютерной структурной химии[Электронный ресурс]: учебное пособие /Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с	Электронный ресурс	+
5.	Опейда, Й.О. Математичне та комп'ютерне моделювання в хімії [Електронний ресурс] / Й.О. Опейда; Ін-т фізико-орган. хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка НАН України. – Донецьк: ДонНУ, 2013. / Опейда, И.А. Математическое и компьютерное моделирование в химии [Электронный ресурс] / И.А. Опейда; Ин-т физико-орган. химии и углехимии им. Л.М. Литвиненко НАН Украины. – Донецьк : ДонНУ, 2013.	Электронный ресурс	
Дополнительная			
6.	Semiempirical and DFT Modeling of the IR Spectra of Benzoyl Peroxide Derivatives / N.A. Turovskij et al. // On the borders of physics, chemistry, biology, medicine and agriculture. Research and development / ed. O.V. Stoyanov, E. Ktodzińska, G.E. Zaikov; Inst. for Engineering of Polymer Materials and Dyes. – Toruń, 2014. – Vol. II. – P. 131-143. http://repo.donnu.ru:8080/jspui/handle/123456789/4321	Электронный ресурс	+
7.	Ракша, О.В. Інформатика, інформаційні технології [Електронний ресурс]: для студ. хім. спец. / О.В. Ракша, О.М. Пастернак, М.А. Туровський; Донецький нац. ун-т. – Донецьк:	Электронный ресурс	+

	ДонНУ, 2011. – 118 с. Ракша, Е.В. Информатика, информационные технологии [Электронный ресурс]: для студ. хим. спец. / Е.В. Ракша, Е.Н. Пастернак, Н.А. Туровский; Донецкий нац. ун-т. – Донецк: ДонНУ, 2011. – 118 с.		
8.	Коробов, В.И. Химическая кинетика: введение с Mathcad/ Maple/ MCS / В.И. Коробов, В.Ф. Очков. – Москва: Горячая линия-Телеком, 2009. – 384 с.	1	_+
9.	Semiempirical and DFT Modeling of the IR Spectra of Benzoyl Peroxide Derivatives / N.A. Turovskij et al. // On the borders of physics, chemistry, biology, medicine and agriculture. Re-search and development / ed. O.V. Stoyanov, E. Ktodzińska, G.E. Zaikov; Inst. for Engineering of Polymer Materials and Dyes. – Toruń, 2014. – Vol. II. – P. 131-143. http://repo.donnu.ru:8080/jspui/handle/123456789/4321	Электронный ресурс	+

15. ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ

<http://mondnr.ru/> – Министерство образования и науки Донецкой Народной Республики

<http://resobrnadzor.ru/> – Республиканская служба по контролю и надзору в сфере образования и науки

16. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

1. Windows 7 PRO(корпоративная лицензия ДОННУ, лицензия №46484614);
2. WindowsOffice (корпоративная лицензия ДОННУ, лицензия №46472919);
3. MicrosoftVisualStudio (лицензияпрограммыDreamSpark для высших учебных заведений);
4. Лицензия GPL, Apach, BSD для свободного программного обеспечения:
 - Антивирус Касперского;
 - Adobe Acrobat Reader.

Рабочая программа рассмотрена и переутверждена на заседании кафедры физической химии с изменениями (без изменений) на _____ год.

Протокол № от « » _____ г.

Заведующий кафедрой _____

В.М. Михальчук