

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич  
Должность: врио ректора  
Дата подписания: 17.11.2023 12:40:09  
Уникальный программный ключ:  
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf55f08

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Утверждаю:

Руководитель ООП

Никольский В.М.

27 июня 2023 г.



Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)  
Физико-химические методы исследования

Направление подготовки  
04.04.01 Химия

Направленность (профиль)  
Аналитическая химия

Для студентов 1 курса очной формы обучения

Составитель: д.х.н., профессор Алексеев В.Г.

Тверь, 2023

## **I. Аннотация**

### **1. Цель и задачи дисциплины**

Целью освоения дисциплины является: освоение современных расчетных физико-химических методов исследования.

Задачами освоения дисциплины являются:

- изучение теоретических основ современных методов компьютерного моделирования свойств молекул и молекулярных систем;
- освоение работы с необходимым программным обеспечением.

### **2. Место дисциплины в структуре ООП**

Дисциплина «Физико-химические методы исследования» входит в обязательную часть Блока 1. «Дисциплины» учебного плана. Она непосредственно связана с дисциплинами «Актуальные задачи современной химии. Часть 1», «Современные инструментальные методы анализа», «Нанохимия», «Химия координационных соединений». Дисциплина закладывает знания для выполнения научно-исследовательской работы и прохождения научно-исследовательской практики.

**3. Объем дисциплины: 3 зачетных единицы, 108 академических часов, в том числе:**

**контактная аудиторная работа:** лекции - **15** часов, лабораторные работы - **15** часов, в т.ч. лабораторная практическая подготовка - **15** часов;  
**самостоятельная работа: 78** часов.

**4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы**

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ОПК-1 Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в	ОПК-1.2. Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для

избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	решения задач в избранной области химии или смежных наук
ОПК-3 Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	ОПК-3.2. Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности

**5. Форма промежуточной аттестации и семестр прохождения:**

зачет во 2-м семестре.

**6. Язык преподавания:** русский.

**II. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий**

Учебная программа – наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)		Самостоятельная работа, в том числе контроль (час.)
		Лекции	Лабораторные работы	
<i>Раздел 1. Построение компьютерных моделей молекул и молекулярных систем</i>				
Тема 1. Работа с программой Chem Office	7	1	1	5
Тема 2. Работа с программами Spartan, Maestro, Gauss View	8	1	1	6
<i>Раздел 2. Метод молекулярной механики</i>				
Тема 3. Принципы и возможности метода. Силовые поля.	7	1	1	5
Тема 4. Работа с программами Chem Office, Spartan, Macro Model	8	1	1	6
<i>Раздел 3. Метод молекулярной динамики</i>				
Тема 5. Принципы и возможности метода.	7	1	1	5
Тема 6. Работа с программой Chem Office	7	1	1	5
<i>Раздел 4. Метод полуэмпирической квантовой механики</i>				

Тема 7. Принципы и возможности метода. Параметрические модели.	7	1	1	5
Тема 8. Работа с программами GAMESS и MOPAC с использованием интерфейса Chem Office	8	1	1	6
Тема 9. Работа с программами Spartan и Maestro	7	1	1	5
<i>Раздел 5. Методы неэмпирической квантовой механики.</i>				
Тема 10. Методы HF, DFT и MP2. Принципы и возможности.	7	1	1	5
Тема 11. Наборы базисных функций.	7	1	1	5
Тема 12. Работа с программами GAMESS и Gaussian с использованием интерфейса Chem Office	7	1	1	5
Тема 13. Работа с программой Gaussian с использованием интерфейса Gauss View	7	1	1	5
Тема 14. Работа с программой Spartan	7	1	1	5
Тема 15. Работа с программой Jaguar с использованием интерфейса Maestro	7	1	1	5
<b>ИТОГО</b>	<b>108</b>	<b>15</b>	<b>15</b>	<b>78</b>

### III. Образовательные технологии

Учебная программа – наименование разделов и тем ( <i>в строгом соответствии с разделом II РПД</i> )	Вид занятия	Образовательные технологии
<i>Раздел 1. Построение компьютерных моделей молекул и молекулярных систем</i>		
Тема 1. Работа с программой Chem Office	Лекция, практическое занятие	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология исследовательской деятельности (компьютерный эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
Тема 2. Работа с программами Spartan, Maestro, Gauss View	Лекция, практическое занятие	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология исследовательской деятельности (компьютерный эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
<i>Раздел 2. Метод молекулярной механики</i>		
Тема 3. Принципы и возможности метода. Силовые поля.	Лекция, практическое занятие	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология исследовательской деятельности (компьютерный эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии

Тема 4. Работа с программами Chem Office, Spartan, Macro Model	Лекция, практическое занятие	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология исследовательской деятельности (компьютерный эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
<i>Раздел 3. Метод молекулярной динамики</i>		
Тема 5. Принципы и возможности метода.	Лекция, практическое занятие	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология исследовательской деятельности (компьютерный эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
Тема 6. Работа с программой Chem Office	Лекция, практическое занятие	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология исследовательской деятельности (компьютерный эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
<i>Раздел 4. Метод полуэмпирической квантовой механики</i>		
Тема 7. Принципы и возможности метода. Параметрические модели.	Лекция, практическое занятие	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология исследовательской деятельности (компьютерный эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
Тема 8. Работа с программами GAMESS и MOPAC с использованием интерфейса Chem Office	Лекция, практическое занятие	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология исследовательской деятельности (компьютерный эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
Тема 9. Работа с программами Spartan и Maestro	Лекция, практическое занятие	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология исследовательской деятельности (компьютерный эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
<i>Раздел 5. Методы неэмпирической квантовой механики.</i>		
Тема 10. Методы HF, DFT и MP2. Принципы и возможности.	Лекция, практическое занятие	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология исследовательской деятельности (компьютерный эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии

Тема 11. Наборы базисных функций.	Лекция, практическое занятие	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология исследовательской деятельности (компьютерный эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
Тема 12. Работа с программами GAMESS и Gaussian с использованием интерфейса Chem Office	Лекция, практическое занятие	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология исследовательской деятельности (компьютерный эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
Тема 13. Работа с программой Gaussian с использованием интерфейса Gauss View	Лекция, практическое занятие	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология исследовательской деятельности (компьютерный эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
Тема 14. Работа с программой Spartan	Лекция, практическое занятие	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология исследовательской деятельности (компьютерный эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии
Тема 15. Работа с программой Jaguar с использованием интерфейса Maestro	Лекция, практическое занятие	традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), информационные (показ презентаций) технология исследовательской деятельности (компьютерный эксперимент) технология модульного и блочно-модульного обучения здоровьесберегающие технологии

#### **IV. Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации**

Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции ОПК-1 Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчётно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения.

Номер задания	Правильный ответ (ключ)	Содержание вопроса/задания	Критерии оценивания заданий								
<i><b>Задания закрытого типа</b></i>											
1	А. 8-оксихинолин	<b>Какой из фотометрических реагентов может быть использован для определения лантаноидов экстракционно-фотометрическим методом:</b> А. 8-оксихинолин; Б. Диэтилдитиокарбамат натрия; В. Дифенилтиокарбазон.	1 балл за правильный ответ								
2	В. В щелочном водно-ацетоновом растворе	<b>Для определения ионов лития методом прямой фотометрии используется реакция их взаимодействия с азокрасителями с образованием ярко окрашенного комплекса</b> А. В кислом водном растворе; Б. В нейтральном водно-спиртовом растворе; В. В щелочном водно-ацетоновом растворе.	1 балл за правильный ответ								
3	А. борной кислотой	<b>Для количественного определения ртути в образцах рентгенофлуоресцентным методом спектрометр калибруют по смесям, содержащим известное количество сульфата ртути с</b> А. Борной кислотой Б. Бромидом калия; В. Сульфатом калия;	1 балл за правильный ответ								
4	В. рентгено-флуоресцентной спектроскопии.	<b>Обнаружить присутствие индия в горной породе без проведения каких-либо химических реакций можно методом...</b> А. инфракрасной спектроскопии; Б. спектроскопии ядерного магнитного резонанса; В. рентгенофлуоресцентной спектроскопии. Г. масс-спектрометрии	1 балл за правильный ответ								
5	I – Б II – В III – А	<b>Установите правильное соответствие метода исследования и объекта исследования.</b> <table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th>Метод исследования</th> <th>Объект исследования</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>I. ИК спектроскопия</td> <td>А. Раствор в DMSO-d<sub>6</sub></td> </tr> <tr> <td>II. рН-метрическое титрование</td> <td>Б. Раствор в CCl<sub>4</sub></td> </tr> <tr> <td>III. ЯМР спектроскопия на протонах</td> <td>В. Раствор в воде.</td> </tr> </tbody> </table>	Метод исследования	Объект исследования	I. ИК спектроскопия	А. Раствор в DMSO-d <sub>6</sub>	II. рН-метрическое титрование	Б. Раствор в CCl <sub>4</sub>	III. ЯМР спектроскопия на протонах	В. Раствор в воде.	1 балл за одно правильное соответствие
Метод исследования	Объект исследования										
I. ИК спектроскопия	А. Раствор в DMSO-d <sub>6</sub>										
II. рН-метрическое титрование	Б. Раствор в CCl <sub>4</sub>										
III. ЯМР спектроскопия на протонах	В. Раствор в воде.										
6	В. 8 мл	<b>Какой объём 0.05 М раствора Трилона Б потребуется для комплексонометрического титрования 100 мл раствора, содержащего 0.0015 М MgCl<sub>2</sub> и 0.0025 М CaCl<sub>2</sub>?</b> А. 3 мл	1 балл за правильный ответ								

		<b>Б. 5 мл</b> <b>В. 8 мл</b>	
7	В Г Б А	<b>Вам необходимо приготовить образец для определения концентрации раствора хлорида железа(III) методом комплексонометрического титрования. Укажите правильную последовательность действий.</b> <b>А. Поместить в колбу аликвоту раствора FeCl<sub>3</sub></b> <b>Б. Поместить в колбу аликвоту раствора индикатора</b> <b>В. Поместить в колбу 100 мл бидистиллированной воды</b> <b>Г. Поместить в колбу аликвоту буферного раствора</b>	1 балл за правильный ответ
8	Б. Не верно	<b>Верно ли утверждение «Метод ИК спектроскопии используется для определения элементного состава образца»?</b> <b>А. Верно</b> <b>Б. Не верно</b>	1 балл за правильный ответ
9	А В Б	<b>Вам необходимо приготовить раствор для определения концентрации железа(III) фотометрическим методом. Укажите правильную последовательность действий.</b> <b>А. Поместить в колбу аликвоту раствора соли железа(III)</b> <b>Б. Поместить в колбу аликвоту аммиачного буферного раствора</b> <b>В. Поместить в колбу аликвоту раствора сульфосалициловой кислоты</b>	1 балл за правильный ответ
10	Б. Не верно	<b>Верно ли утверждение «Метод ИК спектроскопии используется для определения состава координационных соединений»?</b> <b>А. Верно</b> <b>Б. Не верно</b>	1 балл за правильный ответ
<b><i>Задания открытого типа</i></b>			
1	рентгеноструктурного	<b>Длина химической связи между комплексообразователем и донорным атомом лиганда может быть определена методом _____ анализа</b>	1 балл за правильный ответ
2	стеклянный	<b>Для определения констант образования комплексных соединений методом рН-метрического титрования в качестве индикаторного используется _____ электрод</b>	1 балл за правильный ответ
3	таблетки, спрессованной из смеси порошков исследуемого вещества и бромида калия	<b>Для изучения структуры твёрдого комплексного соединения методом ИК спектроскопии нужно приготовить образец в виде _____</b>	1 балл за правильный ответ

4	аммиачный	При определении жёсткости воды методом комплексонометрического титрования используется _____ <b>буферный раствор</b>	1 балл за правильный ответ
5	красный	Одной из качественных реакций на присутствие лития в пробе является окрашивание пламени газовой горелки в _____ <b>цвет.</b>	1 балл за правильный ответ
6	азотной и хлористоводородной	Для количественного определения золота методом атомно-абсорбционной спектроскопии калибровочные растворы готовят, растворяя навески золота в смеси концентрированных кислот _____	1 балл за правильный ответ
7	Экстракционно-фотометрическим	<b>8-оксихинолин</b> используется как фотометрический реагент для определения катионов металлов _____ методом	1 балл за правильный ответ
8	катионного	Анионные поверхностно-активные вещества могут быть определены экстракционно-фотометрическим методом с использованием в качестве фотометрических реагентов трифенилметановых красителей _____ типа	1 балл за правильный ответ
9	фторида калия	Для количественного определения циркония может быть использован метод титрования в солянокислом растворе в присутствии ализарина раствором _____	1 балл за правильный ответ
10	различия в устойчивости их комплексных соединений	Современные методы разделения катионов лантаноидов основаны на _____	1 балл за правильный ответ

Типовые контрольные задания для проверки уровня сформированности компетенции ОПК-3. Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности.

Номер задания	Правильный ответ (ключ)	Содержание вопроса/задания	Критерии оценивания заданий
<b>Задания закрытого типа</b>			
1	В. Необходим компьютерный кластер или суперкомпьютер.	Для моделирования процессов самоорганизации в растворах дендримеров методом молекулярной динамики А. Достаточно вычислительной мощности обычного ноутбука.	1 балл за правильный ответ

		Б. С этой задачей справится настольный персональный компьютер; В. Необходим компьютерный кластер или суперкомпьютер.									
2	В. Неэмпирической квантовой механики	<b>Какой метод обеспечивает корректный расчёт парциальных зарядов атомов в молекуле?</b> А. Молекулярной механики; Б. Полуэмпирической квантовой механики; В. Неэмпирической квантовой механики.	1 балл за правильный ответ								
3	А. Функционала электронной плотности	<b>Корректный расчёт энергии молекулярных орбиталей возможен методом</b> А. Функционала электронной плотности; Б. Хартри-Фока	1 балл за правильный ответ								
4	А. Неэмпирической квантовой механики Б. Полуэмпирической квантовой механики;	<b>Программа Gaussian позволяет проводить расчёты методами</b> А. Неэмпирической квантовой механики; Б. Полуэмпирической квантовой механики; В. Молекулярной механики; Г. Молекулярной динамики	1 балл за каждый правильный ответ								
5	А. Ascalaph Designer Б. GAMESS Г. MOPAC Д. ORCA	<b>Какие из перечисленных программ являются свободно распространяемыми (бесплатными) для использования в учебных заведениях?</b> А. Ascalaph Designer Б. GAMESS В. Gaussian Г. MOPAC Д. ORCA Е. Spartan	1 балл за каждый правильный ответ								
6	I – В II – А III - Б	<b>Установите правильное соответствие метода расчёта и решаемой задачи</b> <table border="1" data-bbox="657 1402 1275 1785"> <thead> <tr> <th>Метод</th> <th>Задача</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>I. Мёллера-Плессе</td> <td>А. Расчёт УФ спектра поглощения</td> </tr> <tr> <td>II. Time-depended DFT</td> <td>Б. Расчёт конформации макромолекулы в растворе</td> </tr> <tr> <td>III. Молекулярной динамики</td> <td>В. Расчёт водородных связей</td> </tr> </tbody> </table>	Метод	Задача	I. Мёллера-Плессе	А. Расчёт УФ спектра поглощения	II. Time-depended DFT	Б. Расчёт конформации макромолекулы в растворе	III. Молекулярной динамики	В. Расчёт водородных связей	1 балл за каждый правильный ответ
Метод	Задача										
I. Мёллера-Плессе	А. Расчёт УФ спектра поглощения										
II. Time-depended DFT	Б. Расчёт конформации макромолекулы в растворе										
III. Молекулярной динамики	В. Расчёт водородных связей										
7	Б. неправильным	<b>Выбор полуэмпирического метода PM6 для расчёта ИК спектра фуллерена C<sub>60</sub> является</b> А. правильным Б. неправильным	1 балл за правильный ответ								
8	Б. Неверно	<b>Верно ли утверждение: при расчёте геометрии молекулы фуллерена C<sub>60</sub> использование базиса 6-31G<sup>**++</sup> обеспечит</b>	1 балл за правильный ответ								

		<b>более высокую точность по сравнению с базисом 6-31G*+ ?</b> А. Верно Б. Неверно											
9	Б. Невозможно	<b>Возможно ли использование базиса 6-31G*+ для расчёта геометрии нанокластеров серебра?</b> А. Возможно Б. Невозможно	1 балл за правильный ответ										
10	I – Г II – В III – А IV – Б	<b>Установите правильное соответствие</b> <table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th style="width: 50%;">Функционал</th> <th style="width: 50%;">Тип функционала</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>I. BLYP</td> <td>A. meta-GGA</td> </tr> <tr> <td>II. B3LYP</td> <td>Б. Long range corrected</td> </tr> <tr> <td>III. TPSS</td> <td>В. Hybrid GGA</td> </tr> <tr> <td>IV. ωB97X-D</td> <td>Г. GGA</td> </tr> </tbody> </table>	Функционал	Тип функционала	I. BLYP	A. meta-GGA	II. B3LYP	Б. Long range corrected	III. TPSS	В. Hybrid GGA	IV. ωB97X-D	Г. GGA	1 балл за каждый правильный ответ
Функционал	Тип функционала												
I. BLYP	A. meta-GGA												
II. B3LYP	Б. Long range corrected												
III. TPSS	В. Hybrid GGA												
IV. ωB97X-D	Г. GGA												
<b>Задания открытого типа</b>													
1	Мёллера-Плессе	<b>Для расчёта нековалентных взаимодействий между молекулами (водородных связей, π-π-стекинга) обычно используют метод _____.</b>	1 балл за правильный ответ										
2	полуэмпирической квантовой механики	<b>Программа MOPAC предназначена для расчёта геометрии и свойств молекул и молекулярных систем методом _____</b>	1 балл за правильный ответ										
3	скорость вычислений	<b>Преимуществом полуэмпирических методов расчёта по сравнению с неэмпирическими является высокая _____</b>	1 балл за правильный ответ										
4	молекулярной динамики	<b>Моделирование процессов самоорганизации в растворах дендримеров проводят методом _____</b>	1 балл за правильный ответ										
5	молекулярной механики	<b>Для расчёта оптимальной (энергетически выгодной) конформации сложной органической молекулы обычно используют метод _____</b>	1 балл за правильный ответ										
6	функционала электронной плотности	<b>Для расчёта ИК спектра обычно используют метод _____</b>	1 балл за правильный ответ										
7	молекулярной механики	<b>В основе программ молекулярного докинга (предсказания биологической активности), как правило, лежит метод _____</b>	1 балл за правильный ответ										

8	параметрической модели	Достоинством программы MOPAC 2016 является возможность использования _____ РМ7 для расчёта макромолекул дендримеров	1 балл за правильный ответ
9	силовые поля	Программа Chem3D позволяет использовать для оптимизации структуры молекул _____ MM2 и MMFF94	1 балл за правильный ответ
10	гибридных	Широко используемый для расчётов методом DFT функционал B3LYP относится к типу _____ функционалов	1 балл за правильный ответ

## V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### 1) Рекомендуемая литература

#### а) Основная литература:

Бутырская Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView / Бутырская Е.В.. – Москва : СОЛОН-ПРЕСС, 2017. – 224 с. – ISBN 978-5-91359-095-4. – Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. – URL: <http://www.iprbookshop.ru/90299.html>

#### б) Дополнительная литература:

1. Белащенко Д.К. Компьютерные методы в физике и физической химии : лабораторный практикум / Белащенко Д.К. – Москва : Издательский Дом МИСиС, 2012. – 109 с. – Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. – URL: <http://www.iprbookshop.ru/56068.html>

2. Бурмистрова Н.А. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие для студентов, обучающихся по направлению подготовки 04.03.01 «Химия» / Бурмистрова Н.А., Пожаров М.В., Смотров М.П.. – Саратов : Издательство Саратовского университета, 2020. – 68 с. – ISBN 978-5-292-04637-0. – Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. – URL: <http://www.iprbookshop.ru/106265.html>

### 2) Программное обеспечение

#### а) Лицензионное программное обеспечение

Kaspersky Endpoint Security 10 акт на передачу прав ПК545 от 16.12.2022

#### б) Свободно распространяемое программное обеспечение

Google Chrome

Яндекс Браузер

Многофункциональный редактор ONLYOFFICE

ОС Linux Ubuntu

Ascalaph Designer

([http://www.biomolecular-modeling.com/Ascalaph/Ascalaph\\_Designer.html](http://www.biomolecular-modeling.com/Ascalaph/Ascalaph_Designer.html))

### 3) Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

№ п/п	Вид информационного ресурса	Наименование информационного ресурса	Адрес (URL)
1.	Электронно-библиотечная система	«Университетская библиотека онлайн»	<a href="https://biblioclub.ru">https://biblioclub.ru</a>
2.	Электронно-библиотечная система	IPR SMART	<a href="https://www.iprbookshop.ru/">https://www.iprbookshop.ru/</a>
3.	Электронно-библиотечная система	«ЮРАЙТ»	<a href="https://urait.ru/">https://urait.ru/</a>
4.	Электронно-библиотечная система	«Лань»	<a href="http://e.lanbook.com">http://e.lanbook.com</a>
5.	Электронно-библиотечная система	«Знаниум»	<a href="https://znanium.com/">https://znanium.com/</a>
6.	Электронно-библиотечная система	Explore Chemistry	<a href="https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/">https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/</a>

### 4) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

1. Электронная библиотека учебных материалов по химии <https://www.chem.msu.su/rus/elibrary/>
2. Электронные химические библиотеки <https://djvu-inf.narod.ru/nclib.htm>
3. Учебные материалы МГУ <https://chembaby.ru/uchebnye-materialy>

## **VI. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины**

### **Задания для самостоятельной работы студентов**

1. Создайте структурную формулу метилэтилкетона, дайте название соединения, рассчитайте его молярную массу, элементный состав и спектр ПМР.
2. Создайте трехмерную модель молекулы трифенилметана. Запустите молекулярно-динамический эксперимент и наблюдайте молекулярные колебания созданной модели.
3. Создайте трехмерную модель молекулы трифенилметана. Рассчитайте оптимальную конформацию и соответствующую энтальпию образования. Рассчитайте термодинамические характеристики молекулы и сравните с табличными данными.
4. Создайте структурную формулу изопропилового эфира масляной кислоты, дайте название соединения, рассчитайте его молярную массу, элементный состав и спектр ПМР.
5. Создайте трехмерную модель молекулы парафина, содержащего 30 углеродных атомов в цепи. Методом молекулярной динамики проведите компьютерный эксперимент по сворачиванию молекулярной цепи в глобулу.
6. Создайте трехмерную модель молекулы дипептида глицилаланина. Рассчитайте оптимальную конформацию и соответствующую энтальпию образования. Рассчитайте термодинамические характеристики молекулы и сравните с табличными данными.

### **Вопросы для подготовки к зачету по дисциплине**

1. Использование программы Chem 3D для создания моделей молекул.
2. Построение моделей путем импорта структурных формул, созданных в ChemDraw.
3. Построение моделей непосредственно в Chem 3D.
4. Создание моделей различного типа (шаростержневых, с визуализацией электронных орбиталей и др.).
5. Перевод моделей в структурные формулы (экспорт в Chem Draw).
6. Использование программы Spartan для создания моделей молекул. Создание моделей различного типа (шаростержневых, с визуализацией электронных орбиталей и др.).
7. Визуализация молекулярных колебаний методом молекулярной динамики
8. Получение моделей молекул в оптимальной конформации.

9. Использование полуэмпирических квантово-механических методов для расчета и визуализации оптимальной конформации молекул.
10. Расчет длины связей и размеров молекул. Расчет теоретических значений термодинамических констант для моделированных молекул.
11. Расчет инфракрасных спектров молекул.

### **VII. Материально-техническое обеспечение**

Проведение лекций обеспечено наличием переносной мультимедийной системы, состоящей из ноутбука и проектора.

### **VIII. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины**

№п.п.	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Реквизиты документа, утвердившего изменения
1.			
2.			