

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
**«Владимирский государственный университет
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»
(ВлГУ)**

Институт биологии и экологии

УТВЕРЖДАЮ:



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
ПРИМЕНЕНИЕ РАСЧЁТНЫХ И КВАНТОВОХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ В
ОРГАНИЧЕСКОМ СИНТЕЗЕ

направление подготовки / специальность

04.04.01 – Химия

направленность (профиль) подготовки

Химия фармацевтических препаратов и биологически
активных веществ

г. Владимир

2022

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью изучения дисциплины «Применение расчётных и квантовохимических методов в органическом синтезе» является освоение слушателями системного подхода к решению конкретных задач химической технологии и органического синтеза, моделирования и оптимизации химико-технологических процессов, а также формирование у обучающихся общетеоретических представлений о физических основах методов квантовой химии, знакомство в необходимых пределах с математическим аппаратом квантовомеханической теории и разъяснение смысла вводимых при этом понятий.

Задачи: в результате освоения данного курса студент должен получить основные навыки системного подхода к моделированию и оптимизации химико-технологических процессов в органическом синтезе. Многие задачи моделирования и оптимизации многофакторных химико-технологических процессов сводятся к ряду абстрактно сформулированных математических задач. Студенты должны иметь всеобъемлющее представление об основных методах моделирования и оптимизации и границах их применимости. Кроме этого обучающихся должны ознакомиться с основами неэмпирических и полуэмпирических методов квантово-химических расчетов в применении к задачам органической химии и подготовка их к пониманию современных работ в области органической химии, выполненных с применением этих методов.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП

Дисциплина «Применение расчётных и квантовохимических методов в органическом синтезе» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений.

3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения ОПОП (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине, в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства
	Индикатор достижения компетенции (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине	
<p>ПК-3 Способен применять современные информационные технологии и специализированные программы для обработки результатов лабораторных испытаний и проведения их анализа.</p> <p>ПК-4 Способен осуществлять научно-исследовательскую и профессиональную деятельность, связанную с контролем качества сырья и физико-химических показателей композиционных материалов и лекарственных средств с использованием эффективных физико-химических методов.</p> <p>ПК-5 Способен производить высокоточные лабораторные исследования, направленные на определение</p>	<p>ПК-3.1. Знает особенности представления результатов анализа химических веществ физико-химическими методами;</p> <p>ПК-3.2. Умеет профессионально подбирать методы математической обработки полученных данных из наиболее подходящих для решения конкретной прикладной задачи химии, физической химии или химической технологии; обрабатывать и анализировать научно-техническую информацию, полученную в ходе исследований;</p> <p>ПК-3.3. Владеет навыками построения алгоритмов, составления и оформления документов и отчетов по результатам профессиональной деятельности с применением современных информационных технологий и специализированных программ.</p> <p>ПК-4.1. Знает стандарты, методики и инструкции, определяющие порядок разработки и оформления отчетной документации по результатам исследований композиционных материалов и лекарственных средств; ориентируется в новейших достижениях в области химии и химической технологии;</p> <p>ПК-4.2. Умеет разрабатывать схемы экспертных исследований; анализировать возможности различных методов, исходя из специфики поставленной исследовательской задачи и интерпретировать полученные результаты;</p> <p>ПК-4.3. Владеет методами выделения, идентификации и пробоподготовки для исследования композиционных материалов и лекарственных средств.</p>	<p>Знает: вспомогательные численные методы решения прикладных задач оптимизации процессов органического синтеза и теоретические основы современных методов квантово-химических расчетов электронной структуры и реакционной способности молекул</p> <p>Умеет: составлять программы на языке DELPHI для реализации решения задач оптимизации органического синтеза, разбираться в уже готовых компьютерных программах с целью их осмысленного применения, оптимизации или модернизации для решения близких задач химии. Использует навыки самостоятельной обработки многомерных химических данных, уметь выбирать наиболее подходящий алгоритм обработки, исходя из задачи исследования.</p> <p>Владеет: основными методами компьютерной обработки результатов научных исследований, основами правильной постановки задач оптимизации химико-технологических процессов и дальнейшей их реализации с целью</p>	тесты, вопросы

<p>химических свойств и состава материалов, проб, образцов и изделий, в т.ч. фармацевтических препаратов</p>	<p>ПК-5.1 Знает теоретические основы методов физико-химического анализа веществ; ПК-5.2. Умеет выбирать методы, инструменты и оборудование, необходимые для проведения анализа химических веществ различной природы; ПК- 5.3. Владеет навыками работы на современном оборудовании, предназначенном для проведения анализа химических свойств и состава материалов, проб, образцов и изделий, в т.ч. фармацевтических препаратов</p>	<p>получения математически обоснованных параметров производственных циклов. Владеет навыками самостоятельной работы с математическим аппаратом квантовой химии для расчетов тех или иных свойств молекулярных систем</p>	
--	---	--	--

4. ОБЪЕМ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетные единицы, 144 часа.

Тематический план форма обучения – очная

№ п/п	Наименование тем и/или разделов/тем дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Контактная работа обучающихся с педагогическим работником				Самостоятельная работа	Формы текущего контроля, форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы.	В форме практической подготовки		
1	Одномерная оптимизация химико-технологических процессов органической химии	3	1-2	2	2			12	
2	Методы многомерной оптимизации в органической химии. Метод покоординатного спуска.	3	3-6	4	4		1	10	Рейтинг-контроль № 1
3	Методы многомерной оптимизации в органической химии. Метод градиентного спуска.	3	7-10	3	3		1	12	Рейтинг-контроль. № 2
4	Теоретические аспекты квантовой химии. Волновая функция. Физический смысл волновой функции. Уравнение Шрёдингера. Стационарное уравнение Шрёдингера	3	10-14	5	5		2	48	
5	Численный расчёт атомных орбиталей и его применение в органической химии	3	15-18	4	4		1	26	Рейтинг-контроль № 3
Всего за 3 семестр:				18	18		5	108	Зачёт
Наличие в дисциплине КП/КР									
Итого по дисциплине				18	18		5	108	Зачёт

Содержание лекционных занятий по дисциплине

Раздел I. Методы одномерной оптимизации процессов органического синтеза

Тема 1. Задача оптимизации

Содержание темы. Постановка задачи оптимизации – нахождения наиболее оптимальных параметров проведения химико-технологических процессов. Сведение оптимизации к задаче поиска экстремальных значений функций одной и нескольких переменных.

Тема 2. Одномерная оптимизация

Содержание темы. Одномерная оптимизация. Метод золотого сечения. Задачи оптимизации работы теплообменных аппаратов.

Раздел II. Методы многомерной оптимизации процессов органического синтеза

Тема 3. Многомерная оптимизация

Содержание темы. Многомерная оптимизация. Метод покоординатного спуска. Метод градиентного спуска. Метод наискорейшего спуска. Метод сопряжённых градиентов.

Оптимальные условия проведения химических реакций. Реакторы идеального смешения. Реакторы идеального вытеснения.

Тема 4. Оптимизация с ограничениями

Содержание темы. Методы оптимизации с ограничениями и без ограничений. Линейное программирование. Симплекс-метод. Нелинейное программирование.

Раздел III. Теоретические и прикладные аспекты квантовой химии

Тема 5. Теоретические основания квантовой химии

Содержание темы. Теоретические аспекты квантовой химии. Волновая функция.. Физический смысл волновой функции. Свойства волновой функции. Основные постулаты квантовой механики. Общее уравнение Шрёдингера. Стационарное уравнение Шрёдингера. Водородоподобные атомы. Решение уравнения Шрёдингера для одноэлектронных (водородоподобных) атомов.

Тема 6. Прикладные аспекты квантовой химии в органическом синтезе

Понятие о неэмпирических и полуэмпирических квантово-химических расчетах.
Методы оценки реакционной способности.

Содержание практических занятий по дисциплине

1. Одномерная оптимизация химико-технологических процессов органического синтеза.
2. Одномерная оптимизация химико-технологических процессов. Метод золотого сечения.
3. Рейтинг-контроль № 1.
4. Метод покоординатного спуска.
5. Метод покоординатного спуска (продолжение).
6. Метод градиентного спуска.
7. Метод градиентного спуска (продолжение).
8. Рейтинг-контроль № 2 (итоговый).

5. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ И УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

5.1. Текущий контроль успеваемости

Текущий контроль успеваемости приводится по результатам рейтинг-контроля по следующим контрольным вопросам:

Рейтинг-контроль №1

1. Правило Рунге.
2. Сравнительная оценка методов численного интегрирования.
3. Что такое оптимизация?
4. Что понимается под количественной оценкой оптимизируемого качества?
5. Какие типы задач оптимизации существуют?
6. В чем состоит безусловная задача оптимизации?
7. В чем состоит условная задача оптимизации

Рейтинг-контроль №2

1. В каком случае используется одномерная оптимизация?
2. В чем состоит основная задача одномерной оптимизации?
3. Дайте сравнительную характеристику методов одномерной оптимизации.
4. Метод сканирования.
5. Метод локализации.
6. Метод золотого сечения.
7. Метод поиска с использованием чисел Фибоначчи/
8. Методы многомерной оптимизации. Метод покоординатного спуска.
9. Методы многомерной оптимизации. Метод градиентного спуска.

Рейтинг-контроль №3

1. В чём заключается физический смысл волновой функции?
2. В чём отличие уравнения Шрёдингера для ситуации, которая может развиваться во времени, от стационарного уравнения Шрёдингера?

3. Как можно упрощенно объяснить тот факт, что уровни энергии в атоме водорода сближаются по мере приближения значения энергии к верхней границе потенциальной ямы?
4. Какая связь имеется между принципом Паули и пространственными формами молекул? Могли бы существовать вполне определённые пространственные формы молекул, если бы принцип Паули не выполнялся?
5. Что такое принцип максимального перекрытия и как с его помощью можно приближенно объяснить и построить пространственные формы типичных органических молекул?
6. Что нового вносит в описание атомов приближение многих частиц, когда около атома имеется не один, а много электронов?
7. Какой основной принцип заложен в любой приближенный метод решения уравнения Шрёдингера?

5.2. Промежуточная аттестация по итогам освоения дисциплины

Вопросы к зачёту

1. Оптимизация химико-технологических процессов органического синтеза.
2. Одномерная оптимизация методом золотого сечения.
3. Многомерная оптимизация методом покоординатного спуска.
4. Многомерная оптимизация методом градиентного спуска.
5. Типы задач оптимизации существуют. Безусловная задача оптимизации. Условная задача оптимизации.
6. Сравнительная характеристика градиентных методов оптимизации.
7. Описание алгоритма метода наискорейшего спуска.
8. Многомерный поиск. Линейное программирование.
9. Теоретические аспекты квантовой химии. Волновая функция. Обобщённая координата.
10. Физический смысл волновой функции. Свойства волновой функции.
11. Основные постулаты квантовой механики.
12. Общее уравнение Шрёдингера.
13. Стационарное уравнение Шрёдингера.
14. Принцип суперпозиции. Принцип Паули.
15. Водородоподобные атомы. Решение уравнения Шрёдингера для одноэлектронных атомов.
16. Угловая часть волновой функции.
17. Приближённые методы решения стационарного уравнения Шрёдингера

18. Атомные орбитали; радиальная и угловая часть.
19. Графическое представление радиальной и угловой части.
20. Графическое представление полной Ψ -функции.

5.3. Самостоятельная работа обучающегося.

Вопросы для самопроверки

1. В чем состоит общая задача нелинейного программирования?
2. На какие группы делятся методы решения задач безусловной минимизации?
3. Дайте краткую характеристику методов безусловной минимизации: итерационный характер методов; проблема выбора шага; выбор направления поиска.
4. Опишите алгоритм метода покоординатного спуска.
5. Как выбирается направление спуска в методе покоординатного спуска?
6. При выполнении какого условия следует прекратить поиск?
7. Составьте блок-схему метода покоординатного спуска.
8. Дайте сравнительную характеристику градиентных методов оптимизации.
9. Дайте описание алгоритма метода наискорейшего спуска.
10. Как решается проблема выбора шага и направления в методе наискорейшего спуска?
11. Дайте описание алгоритма метода сопряженных направлений.
12. В чем состоит основное отличие методов наискорейшего спуска и сопряженных направлений?
13. Какие методы условной минимизации вы знаете?
14. В чем главное отличие методов условной минимизации от методов безусловной минимизации?
15. Метод сканирования.
16. Каково минимальное количество вычислений целевой функции для метода сканирования?
17. Укажите область использования метода сканирования.
18. Метод штрафных функций.
19. На какие классы можно разделить методы штрафных функций?
20. Чем характеризуются параметрические методы?
21. Многомерный поиск. Линейное программирование.

Фонд оценочных средств для проведения аттестации уровня сформированности компетенций обучающихся по дисциплине оформляется отдельным документом.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1. Книгообеспеченность

Наименование литературы: автор, название, вид издания, издательство	Год издания	КНИГООБЕСПЕЧЕННОСТЬ	
		Количество экземпляров изданий в библиотеке ВлГУ в соответствии с ФГОС ВО	Наличие в электронной библиотеке ВлГУ
1	2	3	4
Основная литература*			
1. Р.Г. Сафин, А.И. Иванов, Н.Ф. Тимербаев. Основы научных исследований. Организация и планирование эксперимента : учебное пособие. Казан. нац. исслед. технол. ун-т. –Казань : Изд-во КНИТУ. 2013.	2013	1	http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785788214122.html
2. Лаврентьев Г.В. Инновационные обучающие технологии в профессиональной подготовке специалистов / Г.В. Лаврентьев, Н.Б. Лаврентьева. – Барнаул: Изд-во Алт. Ун-та, 2002.	2002		http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996323128.html
3. 4. Ф.И. Карманов, В.А. Острейковский. Статистические методы обработки экспериментальных данных. Лабораторный практикум с использованием пакета MathCad: Учеб. Пособие. М.: Абрис, 2012.	2001	2	http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785437200599.html
Дополнительная литература			
1 В. Н. Лобко. Математические методы в химии и химической технологии. Численные методы решения алгебраических задач и обработки функций. Учебное пособие. Владимир: Изд-во ВлГУ, 2019.	2019	1	http://e.lib.vlsu.ru:80/handle/123456789/8267
2. Маликов Р.Ф. Основы математического моделирования. Изд.: Горячая линия-Телеком. 2010.	2010		http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=5169

6.2. Периодические издания

1. Журнал органической химии.

6.3. Интернет-ресурсы

1. <http://www.y10k.ru/books/>
3. <http://www.abc.chemistry.bsu.by/current/fulltext.htm>
4. <http://www.sciencedirect.com>
5. <http://chemteq.ru/lib/book>
6. <http://www.chem.msu.su/rus>
2. <http://www.y10k.ru/books/>
3. <http://www.abc.chemistry.bsu.by/current/fulltext.htm>
4. <http://www.sciencedirect.com>
5. <http://chemteq.ru/lib/book>
6. <http://www.chem.msu.su/rus>

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Для реализации данной дисциплины имеются специальные помещения для проведения занятий лекционного типа, занятий практического типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации. Практика проводится в лаборатории 422-2, 423-2.

При чтении лекционного курса используются мультимедийные средства обучения в виде набора слайдов с демонстрацией через проектор.

Перечень используемого лицензионного программного обеспечения: Windows 10, Lazarus, Microsoft Office 2013, Power Point, Adobe Reader,

Рабочую программу составил доцент Лобко В.Н.

Рецензент
(представитель работодателя)

«Биохимресурс», научный сотрудник

к.х.н.

Д.К. Лаврухин

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии

Протокол № 14 от 23.06 2022 г.

Заведующий кафедрой

Н.Н. Смирнова

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании учебно-методической комиссии
направления 04.04.01 – «Химия»

Протокол № 14 от 23.06 2022 г.

Председатель комиссии

Н.Н. Смирнова

**ЛИСТ ПЕРЕУТВЕРЖДЕНИЯ
РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ**

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

