

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**Федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный  
университет им. Н.И. Лобачевского»**

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО  
решением ученого совета ННГУ  
протокол от  
«16» июня 2021 г. № 8

**Рабочая программа дисциплины  
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В ХИМИИ**

---

Уровень высшего образования

**Специалитет**

---

Направление подготовки / специальность

**04.05.01 – Фундаментальная и прикладная химия**

---

Направленность образовательной программы

**Неорганическая химия**

---

Форма обучения

**Очная**

---

Нижний Новгород  
2021 год

## Лист актуализации

---

---

### Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

04 июня 2021 г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 2021-2022 учебном году на заседании кафедры физической химии.

Протокол от \_\_\_\_\_ 20\_\_ г. № \_\_\_\_  
Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

---

---

### Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

\_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 20\_\_-20\_\_ учебном году на заседании кафедры \_\_\_\_\_

Протокол от \_\_\_\_\_ 20\_\_ г. № \_\_\_\_  
Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

---

---

### Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

\_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 20\_\_-20\_\_ учебном году на заседании кафедры \_\_\_\_\_

Протокол от \_\_\_\_\_ 20\_\_ г. № \_\_\_\_  
Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

---

---

### Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

\_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 20\_\_-20\_\_ учебном году на заседании кафедры \_\_\_\_\_

Протокол от \_\_\_\_\_ 20\_\_ г. № \_\_\_\_  
Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

## 1. Место и цели дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина «Вычислительные методы в химии» относится к базовой части Блока 1 ОПОП по направлению подготовки 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (Б1.0.02.06.), является обязательной для освоения студентами очной формы обучения на втором году в 4 семестре.

Для освоения дисциплины студенты используют знания, умения и виды деятельности, сформированные в процессе изучения дисциплин «Неорганическая химия», «Физика», «Математика», «Аналитическая химия», «Информатика». Дисциплина «Вычислительные методы в химии» является основой для изучения таких областей знания как физическая химия, органическая химия, высокомолекулярные соединения, основы химической технологии.

## 2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства
	Индикатор достижения компетенции* (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине**	
<b>ОПК-3</b> Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения	<b>ОПК-3.1.</b> Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	<i>Знать</i> о главных задачах и объектах исследования математической химии как науки, ее междисциплинарных связях; о составе, математическом формализме и алгоритмах основных методов математической химии.	Контрольные работы; экзамен
	<b>ОПК-3.2.</b> Использует стандартное программное обеспечение и специализированные базы данных при решении задач профессиональной деятельности	<i>Уметь</i> находить математический метод для решения химических задач; формулировать алгоритмы решения основных задач математической химии вычислительными методами; описывать ход решения и алгоритмы основных методов и приемов математической химии, таких как методы корреляционного анализа, методы решения систем линейных алгебраических уравнений, вычисление определителей, решение задачи на собственные значения и собственные вектора матриц, решение алгебраических	

		<p>уравнений при помощи метода Гаусса и методами корреляции, решение дифференциальных уравнений методами Эйлера и Рунге-Кутты, решение систем дифференциальных уравнений, вычисление определенных интегралов; описывать основные алгоритмы математических методов в химии и химической технологии; планировать проведение исследований математическими методами при решении задач химии и химической технологии.</p> <p><i>Владеть навыками</i> построения математических моделей химических процессов; выбора математических методов и алгоритмов математических моделей химических процессов, в основе которых лежит корреляционный анализ, решение систем линейных алгебраических уравнений, решение алгебраических уравнений, решение дифференциальных уравнений, решение систем дифференциальных уравнений, вычисление интегралов, методы оптимизации, в том числе поиск минимумов, максимумов и седловых точек на поверхностях потенциальной энергии; методы квантовой химии, молекулярной механики и молекулярной динамики, методы Монте Карло.</p>	
<p><b>ОПК-5</b> Способен использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности</p>	<p><b>ОПК-5.1.</b> Использует современные ИТ-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля, соблюдая нормы и требования информационной безопасности</p> <p><b>ОПК-5.2.</b> Использует</p>	<p><i>Знать</i> о поиске, хранении и анализе химической информации; об алгоритмах, основных методах применения информационных технологий в химии; о способах визуализации химической информации и о способах оценки ее релевантности; о предмете и основных понятиях хемоинформатики; об основных информационных ресурсах и их доступности; о методе виртуального скрининга в химии и химической фармакологии; о базах данных и базах знаний в</p>	<p>Контрольные работы; экзамен</p>

	<p>стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности</p> <p><b>ОПК-5.3.</b> Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием</p>	<p>химии и химической технологии.</p> <p><i>Уметь</i> осуществлять поиск химической информации при помощи сетевых технологий; составлять запросы и проводить поиск в сетевых информационных ресурсах; находить оптимальный метод для решения химических задач методом поиска и анализа химической информации при помощи компьютерных технологий; составлять запросы к базам данных и информационным ресурсам в области химии и химической технологии.</p> <p><i>Владеть</i> навыками работы с информационными ресурсами сетей в области химии и химической технологии; методами оптимизации запроса на поиск химической информации; методами оценки химической информации: ее релевантности, полноты, однозначности; методами визуализации химической информации.</p>	
--	--	---	--

### 3. Структура и содержание дисциплины

#### 3.1 Трудоемкость дисциплины

	<b>очная форма обучения</b>
<b>Общая трудоемкость</b>	<b>3 ЗЕТ</b>
<b>Часов по учебному плану</b>	<b>108</b>
<b>в том числе</b>	
<b>аудиторные занятия (контактная работа):</b> - занятия лекционного типа - занятия семинарского типа - КСРИФ	 <b>32</b> <b>32</b> <b>3</b>
<b>самостоятельная работа</b>	<b>5</b>
<b>Промежуточная аттестация – зачет, экзамен</b>	<b>36</b>

### 3.2. Структура дисциплины

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины	Всего (часы)			В том числе											
				Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них									Самостоятельная работа обучающегося, часы		
	Занятия лекционного типа			Занятия семинарского типа			Занятия лабораторного типа			Всего					
	Очная	Очно-заочная	Заочная	Очная	Очно-заочная	Заочная	Очная	Очно-заочная	Заочная	Очная	Очно-заочная	Заочная	Очная	Очно-заочная	Заочная
1. Предмет дисциплины «Вычислительные методы в химии»	4			2			2					4			
2. Теория корреляционных зависимостей в химии, химической технологии, биологии и медицине	9			5			3					8			1
3. Методы линейной алгебры в химии и химической технологии	7			4			3					7			
4. Методы решения алгебраических уравнений	5			2			3					5			
5. Вычисление определенного интеграла	6			2			3					5			1
6. Решение дифференциальных уравнений	5			2			3					5			
7. Решение систем дифференциальных уравнений	5			2			3					5			
8. Приближение Борна-Оппенгеймера - методологическая	7			3			3					6			1

основа изучения свойств атомов и молекул															
9. Методы поиска минимума и максимума функции нескольких переменных	5		2		3					5					
10. Методы построения поверхностей потенциальной энергии	8		4		3					7			1		
11. Основы информационных технологий в химии и химической технологии	8		4		3					7			1		
Контроль самостоятельной работы	3														
Промежуточная аттестация – зачет, экзамен	36														
<b>Итого</b>	<b>108</b>		<b>32</b>		<b>32</b>					<b>32</b>			<b>5</b>		

Текущий контроль успеваемости реализуется в рамках групповых или индивидуальных консультаций. Промежуточная аттестация проходит в виде **зачета** и **экзамена**.

### 3.3. Структура дисциплины

#### **Тема 1. Предмет дисциплины «Вычислительные методы в химии»**

Предмет дисциплины «Математические методы в химии». Современная математическая химия и ее слияние с компьютерными науками. Применение математических методов не только для обработки экспериментальных данных, но и для получения новой химической информации.

Общий обзор методов математической химии и этапов ее развития.

Информационные технологии в качестве основы современной научной методологии в химии и химической технологии.

#### **Тема 2. Теория корреляционных зависимостей в химии, химической технологии, биологии и медицине.**

Постановка задачи в теории корреляционных зависимостей в химии и химической технологии. Корреляционные математические модели. Границы применимости корреляционных моделей.

Применение метода наименьших квадратов для нахождения простейших корреляционных зависимостей. Понятие о функции невязки. Множественная корреляция. Коэффициент корреляции.

Применение метода наименьших квадратов для определения состава сложных смесей химических веществ по результатам спектрального анализа.

### **Тема 3. Методы линейной алгебры в химии и химической технологии**

Способы решения систем линейных алгебраических уравнений. Метод Гаусса и Зейделя. Их преимущества и недостатки.

Линейная алгебра как основа вычислительной компьютерной химии.

### **Тема 4. Методы решения алгебраических уравнений**

Метод деления отрезка, содержащего корень пополам как метод решения уравнений. Преимущества и недостатки метода.

Метод Ньютона-Рафсона для численного решения уравнения. Преимущества и недостатки метода. Вычислительный алгоритм метода.

Химические задачи, при решении которых возникает проблема численного решения алгебраического уравнения.

### **Тема 5. Вычисление определенного интеграла**

Геометрическая интерпретация определенного интеграла.

Химические задачи, приводящие к необходимости вычисления интегралов.

Метод трапеций и метод Симпсона. Метод Котеса и квадратуры Гаусса. Их вычислительные алгоритмы методов. Преимущества и недостатки методов. Оценки точности различных численных методов.

Метод Монте-Карло для численного решения дифференциальных уравнений. Алгоритм метода. Преимущества и недостатки метода. Оценка точности метода Монте-Карло.

### **Тема 6. Решение дифференциальных уравнений**

Постановка задачи для численного решения дифференциальных уравнений. Основные химические задачи, которые приводят к необходимости решения дифференциальных уравнений.

Методы Эйлера и Рунге-Кутты. Сравнение их точности. Алгоритмы методов.

### **Тема 7. Решение систем дифференциальных уравнений**

Основные химические задачи, которые приводят к необходимости решения систем дифференциальных уравнений.

Методы Эйлера и Рунге-Кутты. Сравнение их точности. Алгоритмы методов.

Решение систем дифференциальных уравнений методом интегрального преобразования.

Решение задач химической кинетики. Формулировка задачи и "алгоритм" ее решения.

### **Тема 8. Приближение Борна-Оппенгеймера - методологическая основа изучения свойств атомов и молекул**

Теорема Борна-Оппенгеймера – методологическая основа для изучения строения молекул. Понятие об электронной и ядерной волновой функции. Физический смысл понятия "поверхность потенциальной энергии".

Особые точки на поверхности потенциальной энергии химической системы. Их классификация. Применение метода определителей Гесса для определения вида точки. Точки минимума, максимума и седловые точки. Их "химический" смысл.

### **Тема 9. Методы поиска минимума и максимума функции нескольких переменных**

Метод наискорейшего спуска. Его преимущества и недостатки при решении химических задач. Метод сопряженных градиентов. Метод Ньютона-Рафсона. Особенности сходимости к оптимальной конфигурации. Использование определителя Гесса.

Алгоритм применения методов Монте-Карло для решения задачи оптимизации. Преимущества и недостатки метода.

## Тема 10. Методы построения поверхностей потенциальной энергии

Метод молекулярной механики как основа для построения поверхности потенциальной энергии и для оптимизации геометрических параметров. Основные вычислительные программы, предназначенные для этой цели.

Метод квантовой химии как основа для построения поверхности потенциальной энергии и для оптимизации геометрических параметров. Основные вычислительные программы, предназначенные для этой цели.

Метод молекулярной динамики. Его алгоритм и основные задачи, решаемые с его использованием.

Метод Монте-Карло для поиска оптимальной геометрии молекулярной системы.

## Тема 11. Основы информационных технологий в химии и химической технологии

Понятие об информации и информационных потоках. Особенности химической информации.

Понятие о базах данных и базах знаний. Наиболее часто используемые в химии базы данных и базы знаний. Составление запроса к базам данных и получение ответа на запрос.

Информационная система Интернет. Особенности использования ее в химии и химической технологии.

Грамматика составления запросов в основных поисковых системах. Металингвистические выражения. Алгоритм оптимального поиска информации в компьютерных сетях.

Лабораторные практикумы и семинарские занятия не предусмотрены.

## 4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Контрольные вопросы и задания для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины приведены в п. 5.2.1. Обучающийся самостоятельно изучает рекомендованную преподавателем литературу по изучаемой дисциплине. Преподаватель проводит проверку усвоения обучаемым компетенций в виде собеседования и ответа на экзаменационные вопросы на экзамене ( Приложение 1 в ФОС к программе).

## 5. Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю), включающий

### 5.1. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине

Уровень сформированности компетенций (индикатора достижения компетенций)	Шкала оценивания сформированности компетенций						
	плохо	неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	очень хорошо	отлично	превосходно
	Не зачтено		зачтено				
<u>Знания</u>	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полностью знания	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки.	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок.	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок.	Уровень знаний в объеме, превышающем программу

	вследствие отказа обучающегося от ответа			негрубых ошибок	несущественных ошибок		подготовки.
<u>Умения</u>	Отсутствие минимальных умений. Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения.  Имели место грубые ошибки.	Продемонстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания но не в полном объеме.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения, решены все основные задачи с отдельными несущественным недочетами, выполнены все задания в полном объеме.	Продемонстрированы все основные умения., Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов
<u>Навыки</u>	Отсутствие владения материалом. Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки.  Имели место грубые ошибки.	Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторыми недочетами	Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами	Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов.	Продемонстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов.	Продемонстрирован творческий подход к решению нестандартных задач

### Шкала оценки при промежуточной аттестации

Оценка	Уровень подготовки	
зачтено	Превосходно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «превосходно»
	Отлично	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «отлично»
	Очень хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «очень хорошо»
	Хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо», при этом хотя бы одна компетенция

		сформирована на уровне «хорошо»
	Удовлетворительно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «удовлетворительно», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «удовлетворительно»
не зачтено	Неудовлетворительно	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно», ни одна из компетенций не сформирована на уровне «плохо»
	Плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

## 5.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения.

### 5.2.1 Контрольные вопросы

<i>Вопросы</i>	<i>Код формируемой компетенции</i>
1. Охарактеризуйте предмет современной компьютерной химии.	ОПК-3, ОПК-5
2. Назовите способы применения компьютеров в современной химии. Кратко охарактеризуйте каждый из них.	ОПК-3, ОПК-5
3. Укажите на различие подходов математики и компьютерной химии при описании химических явлений.	ОПК-3
4. Каким образом с Вашей точки зрения можно получать новое химическое знание при помощи компьютерной химии?	ОПК-3, ОПК-5
5. Что такое математическая модель химического явления? Дайте определение и назовите свойства.	ОПК-3
6. Назовите способы использования математических методов и информационных технологий в химии.	ОПК-3, ОПК-5
7. Можно ли воспользоваться другими, чем сумма квадратов отклонений расчетного значения от экспериментального, способами выражения степени отклонения теоретической кривой от экспериментальной?	ОПК-3
8. Назовите наиболее важные области применения корреляционных зависимостей.	ОПК-3
9. Опишите алгоритм поиска наилучшей корреляционной зависимости для наборов экспериментальных данных.	ОПК-3
10. Опишите алгоритмы применения метода наименьших квадратов для спектрофотометрического анализа состава сложных смесей.	ОПК-3
11. Перечислите преимущества и недостатки применения корреляционного анализа в изучении кинетики органических реакций.	ОПК-3, ОПК-5
12. Почему при поиске корреляционных зависимостей часто применяют метод наименьших квадратов? Объясните происхождение названия метода	ОПК-3

13. Решить методом исключения Гаусса систему уравнений 4-го порядка $\begin{cases} x + 4y + 2z + q = 5 \\ 3x + 5y - 2z + 2q = 7 \\ 4x - 2y + 3z - q = 3 \\ -2x + 3y - 4z + q = -6 \end{cases}$	ОПК-3
14. Разработать алгоритм вычисления определителя $n$ -го порядка методом исключения элементов по Гауссу.	ОПК-3
15. Почему метод простой итерации работает, как правило, медленнее, чем метод Зайделя?	ОПК-3
16. Системы линейных уравнений, у которых коэффициенты при неизвестных могут различаться на несколько десятичных порядков, решаются, как правило, с трудом. Почему? Что нужно сделать, чтобы этого избежать?	ОПК-3
17. Опишите суть алгоритма Гаусса для решения системы неоднородных уравнений с числом переменных равном числу уравнений.	ОПК-3
18. Что такое «аналитические длины волн» в спектрофотометрическом методе анализа?	ОПК-3
19. Как на основании вида разложения спектра поглощения смеси компонентов в виде суммы их гауссовых компонент определить наличие аналитических длин волн?	ОПК-3, ОПК-5
20. При каких условиях для анализа спектров поглощения сложных смесей можно пользоваться приближением аддитивности вкладов компонентов смеси?	ОПК-3
21. Найти формулу для расчета оценочного числа шагов алгоритма в методе деления отрезка пополам для достижения наперед заданной точности.	ОПК-3
22. Разработать алгоритм метода деления отрезка пополам для нахождения нескольких (всех) корней уравнения.	ОПК-3
23. Можно ли в методе деления отрезка использовать его деление не на 2, а на 3 или 4 отрезка?	ОПК-3
24. Опишите метод Ньютона-Рафсона для решения уравнения.	ОПК-3
25. Докажите, что метод Ньютона-Рафсона быстрее, чем метод деления отрезка пополам сходится к решению уравнения.	ОПК-3
26. Опишите алгоритм поиска корней уравнения методом Ньютона-Рафсона.	ОПК-3
27. Назовите химические задачи, приводящие к необходимости поиска корней уравнения.	ОПК-3
28. Расписать подробно рабочие формулы для решения системы уравнений $dy_i/dx = F_i(x, y_1, y_2, \dots, y_n)$ при $i = 1, 2, \dots, n$ методом Эйлера	ОПК-3
29. Расписать подробно рабочие формулы для решения системы уравнений $dy_i/dx = F_i(x, y_1, y_2, \dots, y_n)$ при $i = 1, 2, \dots, n$ методом Рунге-Кутты четвертого порядка.	ОПК-3
30. Почему с Вашей точки зрения увеличение порядка приближения Рунге-Кутты приводит к увеличению точности решения дифференциальных уравнений?	ОПК-3
31. При решении дифференциальных уравнений численными методами наиболее точными являются решения для нескольких первых значений аргумента. Почему?	ОПК-3
32. Что такое начальные и граничные условия? Почему их знание важно при решении дифференциальных уравнений, возникающих в химии или физике?	ОПК-3

33. Почему математические модели, основанные на использовании дифференциальных уравнений и их систем, получили очень широкое распространение в физике и химии?	ОПК-3, ОПК-5
34. Почему метод Симпсона точнее метода прямоугольных трапеций ?	ОПК-3
35. Вычисление интеграла в методе Монте Карло с ошибкой 0.01 заняло 6 секунд. Во сколько раз необходимо увеличить количество испытаний, чтобы ошибка составила 0.001?	ОПК-3
36. Во сколько раз необходимо уменьшить шаг в методе Симпсона, чтобы точность его вычисления возросла в 10 раз? Почему в этом случае можно говорить лишь об оценочных значениях?	ОПК-3
37. В чем отличие метода Котеса и квадратур Гаусса?	ОПК-3
38. Когда целесообразно пользоваться методом Монте-Карло при вычислении определенных интегралов?	ОПК-3
39. Показать, что для функции $f(x,y)=\sin(x)\sin(y)$ точка $(-\pi/2, -\pi/2)$ является максимумом, точка $(-\pi/2, \pi/2)$ является минимумом, а точка $(0,0)$ является седловой точкой.	ОПК-3
40. Почему метод сопряженных градиентов быстрее приводит к точке минимума, чем метод наискорейшего спуска вблизи точки минимума?	ОПК-3
41. Почему поиск экстремума в методе Ньютона-Рафсона является очень точным?	ОПК-3
42. Назовите преимущества и недостатки оптимизации функции методом Монте Карло.	ОПК-3
43. В чем состоит суть приближения Метрополиса?	ОПК-3
44. Объясните, что такое критические точки, и в чем заключаются особенности их классификации	ОПК-3, ОПК-5
45. Что такое поверхность потенциальной энергии для химической реакции? Почему она существует?	ОПК-3, ОПК-5
46. Что такое условная оптимизация?	ОПК-3
47. Почему метод множителей Лагранжа иногда называют методом «штрафов»? В чем суть этого метода?	ОПК-3
48. Опишите алгоритм метода наискорейшего спуска? Почему этот метод «замедляется» вблизи экстремума?	ОПК-3
49. Что такое ППЭ для молекулы? Назовите теоретические основы существования ППЭ в химии	ОПК-3, ОПК-5
50. Что такое критические точки на ППЭ? Назовите способы их идентификации.	ОПК-3, ОПК-5
51. Что такое метод сопряженных градиентов? В чем его отличие от метода наискорейшего спуска?	ОПК-3
52. Что такое матрица Гессе? Опишите основные методы ее использования в методах оптимизации.	ОПК-3
53. Опишите алгоритм методов оптимизации Ньютона-Рафсона. Назовите его преимущества и недостатки.	ОПК-3
54. Опишите метод оптимизации методом Монте-Карло с использованием приближения Метрополиса.	ОПК-3
55. В чем суть метода молекулярной механики?	ОПК-3
56. Назовите основные преимущества и недостатки метода молекулярной механики.	ОПК-3
57. Назовите основные программные комплексы для расчетов методом молекулярной механики и опишите области их наиболее целесообразного применения.	ОПК-3

58. Может ли молекулярной механики полностью заменить применение квантовой химии? Ответ поясните.	ОПК-3
59. Обоснуйте применение для построения потенциалов растяжения химических связей и раскрытия валентных углов квадратичных функций соответствующих разностей между реальными значениями геометрических параметров и их «ссылочных» значений.	ОПК-3
60. Назовите основные области успешного применения квантовой химии в химической науке.	ОПК-3
61. Опишите алгоритм использования квантово-химических расчетов в химических исследованиях.	ОПК-3, ОПК-5
62. Обоснуйте применимость в химии метода ППЭ.	ОПК-3
63. Опишите основные возможности программного комплекса Gaussian 03.	ОПК-3, ОПК-5
64. Назовите средние величины разностей между рассчитанными и при помощи современной квантовой химии и экспериментальными значениями химических величин.	ОПК-3, ОПК-5
65. Опишите принципы выбора подходящего базиса для проведения квантово-химических расчетов.	ОПК-3
66. Опишите принципы выбора начальных геометрических параметров при проведении квантово-химических расчетов	ОПК-3
67. В чем состоит суть метода молекулярной динамики?	ОПК-3
68. Какие факторы влияют на величину временного шага в методе молекулярной динамики?	ОПК-3
69. Опишите особенности поиска информации в поисковой системе GOOGLE.	ОПК-5
70. Перечислите принципы правильного выбора ключевых слов для поиска химической информации.	ОПК-5
71. Что отличает химическую информацию от других видов информации?	ОПК-5
72. Перечислите сайты, наиболее полезные для поиска химической информации.	ОПК-5
73. Что такое хеминформатика?	ОПК-5
74. Как можно использовать принцип "структурный фрагмент молекулы – свойство"?	ОПК-3, ОПК-5
75. Что такое «фармакологическая химия», и как она связана с компьютерной химией?	ОПК-3, ОПК-5
76. Назовите наиболее известные поисковые системы по химии и укажите их адреса.	ОПК-5
77. Назовите наиболее известные электронные химические каталоги и укажите их адреса.	ОПК-5
78. Что такое виртуальный скрининг?	ОПК-5
79. Что такое собственные значения и собственные вектора матрицы?	ОПК-3
80. Опишите «тривиальный» метод решения задачи на собственные значения и собственные вектора.	ОПК-3
81. В чем суть метода Якоби для диагонализации вещественной эрмитовой матрицы?	ОПК-3

### 5.2.2. Типовые тестовые задания для оценки сформированности компетенции ОПК-3:

*Задача 1.* Описать алгоритм решения уравнения методом деления пополам .

*Задача 2.* Описать алгоритм решения системы линейных неоднородных уравнений методом Гаусса

*Задача 3.* Описать алгоритм решения дифференциального уравнения методом Эйлера.

*Задача 4.* Описать алгоритм оптимизации функции нескольких переменных методом наискорейшего спуска.

*Задача 5.* Описать алгоритм условной оптимизации функции нескольких переменных методом множителей Лагранжа.

*Задача 6.* Описать алгоритм решения задачи на поиск собственных значений и собственных векторов методом секулярных детерминантов.

*Задача 7.* Описать алгоритм нахождения определенного интеграла методом Монте-Карло.

### **5.2.3. Типовые задания/задачи для оценки сформированности компетенции ОПК-5**

*Задача 1.* Написать набор ключевых слов для поиска в системе GOOGLE литературных источников по теме «Фотохимические реакции нитросоединений».

*Задача 2.* Составить запрос для поиска информации по теме «Термодинамические свойства фуллеренов» (с использованием грамматики поисковой системы GOOGLE).

*Задача 3.* Опишите алгоритмы представления химической информации.

*Задача 4.* Опишите алгоритм проведения виртуального скрининга.

### **5.2.4. Темы курсовых работ, эссе, рефератов**

1. Компьютерная химия как метод исследования в химии (ОПК-3, ОПК-5).
2. Основные области применения математических методов в химии (ОПК-3, ОПК-5).
3. Роль информационных технологий в химических исследованиях (ОПК-5).
4. Квантовая химия как метод исследования в компьютерной химии (ОПК-3).
5. Метод молекулярной механики и молекулярной динамики как методы получения нового химического знания (ОПК-3).
6. Визуализация химического знания (ОПК-5).

## **6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины**

### **а) Основная литература**

1. Джонсон. К. Численные методы в химии/Пер. с англ.-М.: Мир. 1983.-503с.
2. Jensen F. Introduction to computational chemistry. 2nd ed. - John Wiley & Sons Ltd, Chichester, - 2007.
3. Соловьев М.Е., Соловьев М.М. Компьютерная химия. (Серия "Библиотека студента")- М.: СОЛОН-Пресс, 2005. — 536 с.
4. Зеленцов С.В. Математические методы в химии. Учебное пособие. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2019.-102 с.

### **б) Дополнительная литература**

1. Rogers D. Computational chemistry using the PC 3rd ed., - John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey. - 2003.
2. Young D. C. Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems.- John Wiley & Sons, Inc.- 2001.
3. Бутырская Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView. –М.: СОЛОН-Пресс, 2011.-224 с.
4. Безносюк С. А., Жуковский М. С., Терентьева Ю. В. Математическая химия наноструктурных материалов: учеб. пособие / АлтГУ. - Барнаул : Изд-во АлтГУ, 2013. -123 с.

5. Шарый С.П. Курс вычислительных методов. – Новосибирск, Институт вычислительных технологий СО РАН, 2017. - 553с.

#### **в) Программное обеспечение**

<http://www.ccl.net/chemistry/>  
[www.compchemhighlights.org/](http://www.compchemhighlights.org/)  
[www.acmm.nl/molstim/](http://www.acmm.nl/molstim/)  
<https://www.webmo.net/>  
<https://www.tau.ac.il/>  
<https://research.shanghai.nyu.edu/chemistry>  
<https://www.ncbi.nlm.nih.gov>

#### **7. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

Помещения представляют собой учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных программой, оснащенные оборудованием и техническими средствами обучения: имеется выход в информационные сети; оснащено мультимедийными средствами для показа презентаций.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечены доступом в электронную информационно-образовательную среду.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ВО ННГУ. Приказ ННГУ от 13.05.2020г. № 275-ОД «О введении в действие образовательного стандарта высшего образования – специалитет по специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»

Автор

\_\_\_\_\_ д.х.н., доцент Зеленцов Сергей Васильевич

Рецензент

\_\_\_\_\_ д.т.н., доцент Старостин Николай Владимирович

Заведующий кафедрой

\_\_\_\_\_ д.х.н., профессор Маркин Алексей Владимирович