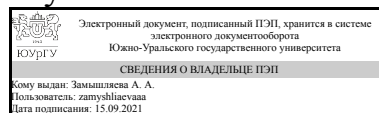


# ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:  
Директор института  
Институт естественных и точных  
наук



А. А. Замышляева

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины П.1.В.07.02 Многомасштабное моделирование в химии-кристаллы для направления 04.06.01 Химические науки

уровень аспирант тип программы

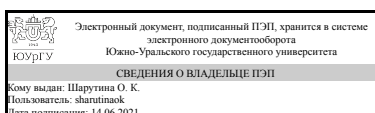
направленность программы

форма обучения очная

кафедра-разработчик Теоретическая и прикладная химия

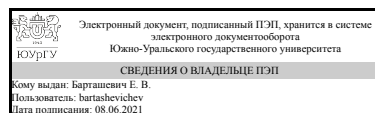
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки, утверждённым приказом Минобрнауки от 29.07.2014 № 869

Зав.кафедрой разработчика,  
д.хим.н., проф.



О. К. Шарутина

Разработчик программы,  
д.хим.н., доц., профессор



Е. В. Барташевич

## 1. Цели и задачи дисциплины

Помочь овладеть методами, алгоритмами и инструментами моделирования структуры и особенностей строения вещества, научиться определяться с масштабным уровнем, необходимым на заданном этапе исследований.

## Краткое содержание дисциплины

Дисциплина раскрывает статус математического моделирования в химии как метода познания. В зависимости от размеров системы могут применяться методы квантовой химии, молекулярной динамики, приближения циклического кластера для поверхностей и кристаллов, модели сплошной среды. Квантовохимические расчеты позволяют сделать выводы на основе распределений электронной плотности. Результаты моделирования должны обеспечивать достоверный прогноз физико-химических свойств, реакционную способность, состояние дисперсных систем, фазовые переходы и свойства наноразмерных объектов.

## 2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (ЗУНы)
ПК-2.2 знанием общих законов, определяющих строение веществ, свойства химических связей и нековалентных взаимодействий; количественные взаимосвязи между химическим составом, структурой вещества и его физико-химическими свойствами	Знать: Теоретические основы моделирования атомно-молекулярных систем.
	Уметь: Работать в приложениях по конструированию молекул, кристаллов, готовить файлы в популярных расчетных форматах, обрабатывать результаты.
	Владеть: Приемами создания и анализа контурных карт электронной плотности, трехмерных изображений структуры кристаллов и характеристик химических связей в конденсированных фазах.
ПК-2.1 умением определять термодинамические характеристики процессов на поверхности, устанавливать закономерности адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях	Знать: Свойства распределения электронной плотности и ее производных в молекулярных кристаллах, кристаллохимическую терминологию.
	Уметь: Моделировать структуру молекулярного кристалла с учетом периодических граничных условий.
	Владеть: Навыками квантово-топологического анализа электронной плотности.

## 3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана	Перечень последующих дисциплин, видов работ
П.1.В.06.02 Современная теория химической связи, П.1.В.04 Математическое моделирование	Подготовка научно-квалификационной работы (диссертации) на соискание ученой степени кандидата наук (8 семестр)

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам студента, необходимым при освоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Дисциплина	Требования
П.1.В.04 Математическое моделирование	Знать принципы использования моделей для определения или уточнения характеристик и способов построения структуры химических соединений. Владеть умением и навыками построения математической модели, оценки адекватности, значимости.
П.1.В.06.02 Современная теория химической связи	Знать терминологию и современную концепцию химических связей и нековалентных взаимодействий. Владеть навыками количественного описания свойств химических связей, умением подбирать и вычислять количественные дескрипторы физико-химических свойств.

#### 4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 ч.

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах	
		Номер семестра	
		5	
Общая трудоёмкость дисциплины	108	108	
<i>Аудиторные занятия:</i>	38	38	
Лекции (Л)	38	38	
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	0	0	
Лабораторные работы (ЛР)	0	0	
<i>Самостоятельная работа (СРС)</i>	70	70	
Подготовка к текущему контролю. Моделирование свойств электронной плотности в кристаллах	15	15	
Подготовка к текущему контролю. Моделирование структуры кристаллов. 3D визуализация структуры.	15	15	
Написание реферата	20	20	
Подготовка к экзамену	20	20	
Вид итогового контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)	-	экзамен	

#### 5. Содержание дисциплины

№ раздела	Наименование разделов дисциплины	Объем аудиторных занятий по видам в часах			
		Всего	Л	ПЗ	ЛР
1	Масштабные уровни описания вещества	10	10	0	0
2	Вычислительные технологии, ориентированные на многомасштабное моделирование в химии	8	8	0	0

3	Моделирование структуры и свойств кристаллов	10	10	0	0
4	3D визуализация атомно-молекулярных систем	10	10	0	0

## 5.1. Лекции

№ лекции	№ раздела	Наименование или краткое содержание лекционного занятия	Кол-во часов
1-2	1	Квантовая химия, молекулярная динамика и моделирование атомно-молекулярных систем из первых принципов.	4
3-5	1	Многоконfigurационные приближения. Теория функционала плотности. Моделирование в приближении изолированного комплекса. Базис плоских волн. Локализованные базисы.	6
6-7	2	Задачи моделирования в химии, требующие высокопроизводительных вычислений и параллельного программирования. Классификация функций MPI и основные понятия.	4
8-9	2	Применение суперкомпьютеров. Обзор высокопроизводительных систем в России и за рубежом. Проблемы энергопотребления и надежности суперкомпьютеров.	4
10-12	3	Периодические граничные условия. Поверхности потенциальной энергии. Единицы измерения. Электрон-электронное взаимодействие: обменно-корреляционное взаимодействие, функционал Кона-Шэма, приближение локальной плотности.	4
13-15	3	Программа CRYSTAL14 - вычисления спектральных свойств: волновых чисел, интенсивностей и активностей ИК и КР спектров. Эластические свойства, модули упругости и сдвига. Электронная плотность в кристаллах: TOPOND14. Квантово-топологический анализ электронной плотности в молекулярных кристаллах.	6
16-17	4	ChemCraft - приложение для визуализации и анализа результатов моделирования молекул, кристаллов, конденсированных фаз.	4
18-19	4	Multiwfn vs TOPOND - сравниваем преимущества визуализации и анализа характеристик электронной плотности.	6

## 5.2. Практические занятия, семинары

Не предусмотрены

## 5.3. Лабораторные работы

Не предусмотрены

## 5.4. Самостоятельная работа студента

Выполнение СРС		
Вид работы и содержание задания	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц)	Кол-во часов
Подготовка к экзамену	Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела Текст учеб. пособие для вузов по химико-технол. направлениям и специальностям В. Г. Цирельсон. - 3-е изд., испр. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. гл. 2, 3.	20

Подготовка к текущему контролю. Моделирование свойств электронной плотности в кристаллах	Журналы, мануалы.	15
Подготовка к текущему контролю. Моделирование структуры кристаллов. 3D визуализация структуры.	Журналы, мануал Crystal14. Topond14.	15
Подготовка реферата.	Журналы: Известия Академии наук, серия Химия. Бейдер, Р. Атомы в молекулах: Квантовая теория Учеб. Р. Бейдер; Пер. с англ. Е. С. Апостоловой и др.; Под ред. М. Ю. Антипина, В. Г. Цирельсона. М.: Мир, 2001. с. 54-160, Гл. 7.	20

## 6. Инновационные образовательные технологии, используемые в учебном процессе

Инновационные формы учебных занятий	Вид работы (Л, ПЗ, ЛР)	Краткое описание	Кол-во ауд. часов
Практиза запуска приложений на суперкомпьютере	НИР	Формирование командной строки, решение о числе используемых узлов для реализации параллельных вычислений.	6

## Собственные инновационные способы и методы, используемые в образовательном процессе

Инновационные формы обучения	Краткое описание и примеры использования в темах и разделах
Лекции и семинары приглашенных ученых	Обсуждение и тренировка в освоении программы моделирования конденсированных состояний CP2K

Использование результатов научных исследований, проводимых университетом, в рамках данной дисциплины: 1. Проект по гранту РФФИ № 14-03-00961 Природа галогенных связей в молекулярных комплексах и кристаллах органических полигалогенидов различного стехиометрического состава. № 17-03-00406 Концепция пниктогенных, халькогенных, галогенных и тетрельных связей в количественной оценке силы нековалентных взаимодействий в кристаллах. 2. Государственное задание 2014106-ГЗ № 729 Дескрипторы структурообразующих взаимодействий на основе электронной плотности в полигалогенидных периодических системах.

## 7. Фонд оценочных средств (ФОС) для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

### 7.1. Паспорт фонда оценочных средств

Наименование разделов дисциплины	Контролируемая компетенция ЗУНы	Вид контроля (включая текущий)	№№ заданий
Все разделы	ПК-2.2 знанием общих законов, определяющих строение веществ, свойства химических связей и	текущий	3

	нековалентных взаимодействий; количественные взаимосвязи между химическим составом, структурой вещества и его физико-химическими свойствами		
Все разделы	ПК-2.1 умением определять термодинамические характеристики процессов на поверхности, устанавливать закономерности адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях	промежуточный	1-2

## 7.2. Виды контроля, процедуры проведения, критерии оценивания

Вид контроля	Процедуры проведения и оценивания	Критерии оценивания
промежуточный	Экзамен. Обсуждение написанного аспирантом реферата на предложенную тему	Отлично: Объем не менее 30 листов, цитируются периодические научные журналы списка Web of Science, приводятся самостоятельно выполненные иллюстрации. Хорошо: Объем менее 30 листов, цитируются периодические научные журналы, приводятся самостоятельно выполненные иллюстрации. Удовлетворительно: Объем не менее 20 листов, цитируются периодические научные журналы, приводятся не самостоятельно выполненные иллюстрации. Неудовлетворительно: Объем менее 20 листов, не цитируются периодические научные журналы, не приводятся иллюстрации.
текущий	Обсуждение индивидуальных заданий (результатов расчетов для кристаллических структур), выполняемых студентом самостоятельно	Зачтено: Расчеты выполнены корректно Не зачтено: Расчеты не выполнены

## 7.3. Типовые контрольные задания

Вид контроля	Типовые контрольные задания
промежуточный	Темы рефератов: 1. Метод Кара-Паринелло: первопринципные расчеты и классическая динамика. 2. Молекулярные машины. 3. Методы QM/MM: квантовая и классическая части. 4. Атомистическое и континуальное описание атомно-молекулярных систем. 5. Особенности моделирования изолированных молекул и кластеров и периодических систем. 6. Современные подходы к учету обменно-корреляционного взаимодействия. 7. Новинки молекулярной графики.
текущий	Задание 1 Подготовьте входные файлы для оптимизации геометрии кристаллов с сохранением параметров ячейки в программе CRYSTAL14 для следующих структур: MELAMI, IJUGOL, UREXPO. Запустите исполняемые файлы. Проанализируйте полученные результаты, сравните отклонения в позициях атомных координат.

	<p>Задание 2</p> <p>Выполните построение карт электронной плотности в кристаллах для следующих плоскостей:</p> <p>1) N – C – O в кристалле UREXPO</p> <p>2) O – Sb – C в кристалле IJUGOL</p> <p>3) ароматического цикла в кристалле MELAMI</p>
--	---

## 8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### Печатная учебно-методическая документация

#### а) основная литература:

1. Бейдер, Р. Атомы в молекулах: Квантовая теория Учеб. Р. Бейдер; Пер. с англ. Е. С. Апостоловой и др.; Под ред. М. Ю. Антипина, В. Г. Цирельсона. - М.: Мир, 2001. - 532 с.
2. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела Текст учеб. пособие для вузов по химико-технол. направлениям и специальностям В. Г. Цирельсон. - 3-е изд., испр. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. - 495 с. ил., [12] л. цв. ил.; табл.

#### б) дополнительная литература:

1. Барташевич, Е. В. Структурная организация и количественные дескрипторы физико-химических свойств соединений с галогенными связями по данным о распределении электронной плотности Текст дис. ... д-ра хим. наук : специальность 02.00.04 - Физическая химия Е. В. Барташевич ; науч. консультант В. Г. Цирельсон ; Юж.-Урал. гос. ун-т ; ЮУрГУ. - Челябинск, 2015. - 242 с. цв. ил.
2. Юшина, И. Д. Физико-химические свойства и структурные особенности халькогеназоло(азино)хинолиниевых полийодидов Текст дис. ... канд. хим. наук : специальность 02.00.04 - Физическая химия И. Д. Юшина ; науч. рук. Е. В. Барташевич ; Юж.-Урал. гос. ун-т ; ЮУрГУ. - Челябинск, 2016. - 183 с. ил.
3. Multiscale modeling in solid mechanics : computational approaches Текст V. G. Kouznetsova et al.; eds. U. Galvanetto, M. H. F. Aliabadi. - London: Imperial College Press, 2010
4. Маделунг, О. Теория твердого тела Пер. с нем. И. В. Мочан; Под ред. А. И. Ансельма. - М.: Наука, 1980. - 416 с. ил.

#### в) отечественные и зарубежные журналы по дисциплине, имеющиеся в библиотеке:

1. ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК. СЕРИЯ ХИМИЧЕСКАЯ

#### г) методические указания для студентов по освоению дисциплины:

1. Мануал для расчетов распределения электронной плотности в кристаллах, исходя из волновой функции

*из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:*

2. Мануал для расчетов распределения электронной плотности в кристаллах, исходя из волновой функции

## Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование разработки	Наименование ресурса в электронной форме	Доступность (сеть Интернет / локальная сеть; авторизованный / свободный доступ)
1	Методические пособия для самостоятельной работы студента	Пособие по составлению входных файлов для расчетов в приближении локализованных атомных орбиталей	Учебно-методические материалы кафедры	Интернет / Свободный

## 9. Информационные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса

Перечень используемого программного обеспечения:

1. BlueSnap-Chemcraft(бессрочно)

Перечень используемых информационных справочных систем:

1. -Thr Cambridge Cristallographic Data Centre(бессрочно)

## 10. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Вид занятий	№ ауд.	Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение, используемое для различных видов занятий
Лекции	407 (1a)	Рабочая станция - компьютеры