

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»**

---

УТВЕРЖДАЮ  
Директор ИБСиБ  
\_\_\_\_\_ А.В. Васин  
«30» мая 2025 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

**«Вычислительная химия»**

Разработчик	Высшая школа биомедицинских систем и технологий
Направление (специальность) подготовки	06.05.01 Биоинженерия и биоинформатика
Наименование ООП	06.05.01_01 Биоинженерия и биоинформатика
Квалификация (степень) выпускника	<b>биоинженер и биоинформатик</b>
Образовательный стандарт	<b>СУОС</b>
Форма обучения	<b>Очная</b>

СОГЛАСОВАНО  
Руководитель ОП  
\_\_\_\_\_ Д.И. Богомаз  
«15» апреля 2025 г.

Соответствует СУОС  
Утверждена протоколом заседания  
высшей школы "ВШБСиТ"  
от «15» апреля 2025 г. № 6

РПД разработал:  
Доцент, к.б.н. Д.И. Богомаз

# 1. Цели и планируемые результаты изучения дисциплины

## Цели освоения дисциплины

1. 1. подготовить специалистов в области теории строения атомов и молекул
2. 2. полученные знания использовать при проведении квантово-химических расчетов химических объектов.

## Результаты обучения выпускника

Код	Результат обучения (компетенция) выпускника ООП
ПК-1	Способен разрабатывать новые алгоритмы обработки цифровой биологической информации, в том числе больших данных
ИД-2 ПК-1	Разрабатывает новые алгоритмы обработки цифровой биологической информации, при использовании высокопроизводительных методов получения данных

## Планируемые результаты изучения дисциплины

### знания:

- Знание новых алгоритмов обработки цифровой биологической информации, при использовании высокопроизводительных методов получения данных

### умения:

- Умение разрабатывать новые алгоритмы обработки цифровой биологической информации, при использовании высокопроизводительных методов получения данных

### навыки:

- Владение методами разработки новых алгоритмов обработки цифровой биологической информации, при использовании высокопроизводительных методов получения данных.

## 2. Место дисциплины в структуре ООП

В учебном плане дисциплина «Вычислительная химия» относится к модулю «Модуль цифровых компетенций (Digital)».

Изучение дисциплины базируется на результатах освоения следующих дисциплин:

- Физика
- Высшая математика

- Цифровая грамотность
- Органическая химия

### 3. Распределение трудоёмкости освоения дисциплины по видам учебной работы и формы текущего контроля и промежуточной аттестации

#### 3.1. Виды учебной работы

Виды учебной работы	Трудоёмкость по семестрам
	Очная форма
Лекционные занятия	30
Лабораторные занятия	30
Самостоятельная работа	57
Часы на контроль	16
Промежуточная аттестация (экзамен)	11
Общая трудоёмкость освоения дисциплины	144, ач
	4, зет

#### 3.2. Формы текущего контроля и промежуточной аттестации

Формы текущего контроля и промежуточной аттестации	Количество по семестрам
	Очная форма
Промежуточная аттестация	
Экзамены, шт.	1

### 4. Содержание и результаты обучения

#### 4.1 Разделы дисциплины и виды учебной работы

№ раздела	Разделы дисциплины, мероприятия текущего контроля	Очная форма		
		Лек, ач	Лаб, ач	СР, ач
1.	Основные понятия квантовой механики	3	3	5
2.	Квантово-механическое описание многоэлектронного атома	3	3	6
3.	Метод Хартри-Фока	3	3	6
4.	Электронная корреляция	3	3	7

5.	Базисные наборы атомных орбиталей	3	3	5
6.	Теория функционала плотности	3	3	7
7.	Полуэмпирические методы	3	3	5
8.	Расчет свойств молекул, полные энергии, теплоты образования молекул, расчет энергий атомизации	3	3	5
9.	Поверхность потенциальной энергии реакции	3	3	5
10.	Квантово-химическое описание реакций в жидкой и твердой фазе	3	3	6
<b>Итого по видам учебной работы:</b>		30	30	57
Экзамены, ач				16
Часы на контроль, ач				16
Промежуточная аттестация (экзамен)		11		
<b>Общая трудоёмкость освоения: ач / зет</b>		144 / 4		

## 4.2. Содержание разделов и результаты изучения дисциплины

Раздел дисциплины	Содержание
<b>1. Основные понятия квантовой механики</b>	Принцип неопределенности Гейзенберга и вероятностный характер квантовой химии. Основные постулаты квантовой химии: о волновой функции, о способе описания физических величин, об основном уравнении квантовой механики, о возможных значениях физических величин, о среднем значении физической величины, принцип суперпозиции, об антисимметричности волновой функции.
<b>2. Квантово-механическое описание многоэлектронного атома</b>	Принципы и приближения, позволяющие решить уравнение Шредингера: вариационный принцип, пробная волновая функция, одноэлектронное приближение (приближение независимых частиц). Метод Хартри, принцип метода самосогласованного поля, процедура самосогласования, минусы и недостатки этой теории. Метод Хартри-Фока. Детерминант Слетера. Основные, кулоновские и обменные интегралы волновой функции. Теорема Купманса. Ограниченный и неограниченный метод Хартри-Фока. Сродство к электрону, электронный химический потенциал, электроотрицательность, абсолютная химическая жесткость, принцип жестких и мягких кислот и оснований. Гамильтониан молекулы, вклады различных членов уравнения в полную энергию системы. Приближение Борна-Оппенгеймера (адиабатическое приближение). Поверхность потенциальной энергии 4молекулы. Расчет энергий вращательных барьеров для простых молекул. Метод Хартри-Фока для молекул (метод МО). Приближение МО ЛКАО. Уравнения Рутаана. Ограничения метода Хартри-Фока
<b>3. Метод Хартри-Фока</b>	Метод Хартри-Фока. Детерминант Слетера. Основные, кулоновские и обменные интегралы волновой функции. Теорема Купманса. Ограниченный и неограниченный метод Хартри-Фока. Сродство к электрону, электронный химический потенциал, электроотрицательность, абсолютная химическая жесткость, принцип жестких и мягких кислот и оснований.

<p><b>4. Электронная корреляция</b></p>	<p>Источники погрешности ССП МО ЛКАО расчетов: несовершенство базисного набора, корреляционная энергия, приближение Борна-Оппенгеймера, релятивистские эффекты. Составляющие электронной корреляции. Пост-хартри-фоковские методы, учитывающие электронную корреляцию: метод конфигурационного взаимодействия, многоконфигурационные методы, теория Меллера-Плессета. Базисные наборы Попла. Расчет энергии диссоциации химических связей.</p>
<p><b>5. Базисные наборы атомных орбиталей</b></p>	<p>Иерархия методов квантовой химии. Неэмпирическая квантовая химия. Угловые и радиальные части атомных орбиталей (АО). Вид аналитических базисных функций. Орбитали Слэтера-Зенера: преимущества и недостатки. Орбитали гауссова типа: преимущества и недостатки. Минимальные базисные наборы STO-KG. Валентно-расщепленные базисные наборы M-NPG. Поляризационные базисные наборы. Диффузные функции. Точность квантово-химических расчетов свойств молекул.</p>
<p><b>6. Теория функционала плотности</b></p>	<p>Теорема Хоэнберга и Кона. Метод Кона-Шама. Сравнение методов Хартри-Фока и Кона-Шама. Корреляционно-обменный функционал. Гибридные методы.</p>
<p><b>7. Полуэмпирические методы</b></p>	<p>Полуэмпирические методы и основные приближения, используемые в полуэмпирических методах: приближение валентных электронов, приближение нулевого дифференциального перекрывания и его разновидности: CNDO, INDO, MINDO. Метод модифицированного пренебрежения дифференциальным перекрыванием и его разновидности: MNDO, AM1, PM3. Разделение <math>\pi</math>-и <math>\sigma</math>-электронов, <math>\pi</math>-электронное приближение. Сравнительная характеристика полуэмпирических методов, анализ их применимости для решения различных химических задач.</p>
<p><b>8. Расчет свойств молекул, полные энергии, теплоты образования молекул, расчет энергий атомизации</b></p>	<p>Расчет свойств молекул. полные энергии, теплоты образования молекул, расчет энергий атомизации. Расчет энергий вращательных барьеров для простых молекул. Метод Хартри-Фока для молекул (метод МО). Приближение МО ЛКАО. Уравнения Рутаана. Ограничения метода Хартри-Фока.</p>

<b>9. Поверхность потенциальной энергии реакции</b>	<p>пределение поверхности потенциальной энергии (ППЭ) химической реакции как совокупности точек, характеризующихся определенной энергией системы при фиксированном положении ядер. Стационарные точки на ППЭ: минимумы, максимумы, точки перегиба. Матрица вторых производных полной энергии молекулы (матрица Гесса). Оптимизация равновесной геометрии молекулы. ППЭ и химическая реакция, элементарный акт химической реакции. Теория переходного состояния химической реакции. Расчет поверхности потенциальной энергии химической реакции. Предсказание энергии активации. Правило Вудворта-Хоффмана. Методы описания химических реакций: теория возмущений, метод координаты реакции, метод граничных молекулярных орбиталей Фукуи. Индексы реакционной способности. Электростатический потенциал.</p>
<b>10. Квантово-химическое описание реакций в жидкой и твердой фазе</b>	<p>Влияние растворителя на профиль ППЭ. Типы сольватации: специфическая и неспецифическая. Энергетика процесса растворения и вклады в полную энергию молекулы в растворителе. Модели учета влияния растворителя. Сольватонная модель. Континуальные модели растворителя, методы самосогласованного реакционного поля: модель реакционного поля Онзагера, РСМ – модель поляризуемого континуума, Модель изоплотности РСМ (IPCM), SCI-PCM, приближение супермолекулы, метод атом-атомных потенциалов, метод Монте-Карло, модель точечных диполей.</p>

## 5. Образовательные технологии

1. Основным видом учебных занятий являются: лекции, лабораторные работы, а также самостоятельная работа студентов. Лекции читаются по основным разделам дисциплины и сопровождаются иллюстративным материалом (презентациями), дающим представление об отрасли химии, использующей компьютерное моделирование для решения химических проблем.
2. Лабораторные занятия закрепляют полученные знания, обучают студентов методам получения и разработки алгоритмов, компьютерных программ для прогнозирования атомарных и молекулярных свойств и путей реакции химических реакций. Лабораторные занятия приучают к самостоятельному анализу полученных результатов. Итоговый контроль практических занятий проходит в виде собеседования в свободной форме.
3. В процессе самостоятельной работы студенты должны научиться свободно владеть основными теоретическими понятиями курса, самостоятельно работать с учебниками и учебными пособиями, самостоятельно работать с научной информацией. Уметь



самостоятельно подготовиться к практическим занятиям, используя основную и дополнительную литературу. Формой итогового контроля является экзамен.

## 6. Лабораторный практикум

№ раздела	Наименование лабораторных работ	Трудоемкость, ач
		Очная форма
1.	Метод ab initio.	3
2.	Методы теории функций плотности (DFT)	4
3.	Методы полуэмпирической квантовой химии	4
4.	Моделирование молекулярной механики	4
5.	Вычислительная химия для твердого тела	3
6.	Химическая динамика. Уравнение Шрёдингера	4
7.	Молекулярная динамика. Законы движения Ньютона	4
8.	Интерпретация функций молекулярных волн.	4
Итого часов		30

## 7. Практические занятия

Не предусмотрено

## 8. Организация и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы

## Примерное распределение времени самостоятельной работы студентов

Вид самостоятельной работы	Примерная трудоемкость, ач
	Очная форма
<b>Текущая СР</b>	
работа с лекционным материалом, с учебной литературой	10
опережающая самостоятельная работа (изучение нового материала до его изложения на занятиях)	10
самостоятельное изучение разделов дисциплины	10
выполнение домашних заданий, домашних контрольных работ	0
подготовка к лабораторным работам, к практическим и семинарским занятиям	27
подготовка к контрольным работам, коллоквиумам	0
<b>Итого текущей СР:</b>	<b>57</b>
<b>Творческая проблемно-ориентированная СР</b>	
выполнение расчётно-графических работ	0
выполнение курсового проекта или курсовой работы	0
поиск, изучение и презентация информации по заданной проблеме, анализ научных публикаций по заданной теме	0
работа над междисциплинарным проектом	0
исследовательская работа, участие в конференциях, семинарах, олимпиадах	0
анализ данных по заданной теме, выполнение расчётов, составление схем и моделей на основе собранных данных	0
<b>Итого творческой СР:</b>	<b>0</b>
<b>Общая трудоемкость СР:</b>	<b>57</b>

## 9. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

### 9.1. Адрес сайта курса

<https://dl-ibmst.spbstu.ru/>

## 9.2. Рекомендуемая литература

### Основная литература

№	Автор, название, место издания, издательство, год (годы) издания	Год изд.	Источник
1	Соколов И.М. Квантовая химия. Теория функционалов плотности, 2020. URL: <a href="http://elib.spbstu.ru/dl/2/s20-58.pdf">http://elib.spbstu.ru/dl/2/s20-58.pdf</a>	2020	ЭБ СПбПУ
2	Блюменфельд Л.А., Кукушкин А.К. Курс квантовой химии и строения молекул: Москва: Изд-во Моск. ун-та, 1980.	1980	ИБК СПбПУ

### Дополнительная литература

№	Автор, название, место издания, издательство, год (годы) издания	Год изд.	Источник
1	Панкина И.А. Методические указания по организации и проведению практических занятий по дисциплине «Общая химия и методы химического анализа», 2020. URL: <a href="http://elib.spbstu.ru/dl/2/s20-170.pdf">http://elib.spbstu.ru/dl/2/s20-170.pdf</a>	2020	ЭБ СПбПУ

### Ресурсы Интернета

1. <http://elib.spbstu.ru/dl/local/2855.pdf>: <http://elib.spbstu.ru/dl/local/2855.pdf>

## 9.3. Технические средства обеспечения дисциплины

1. Microsoft:

WorkStation + Office Pro Plus

Office 365 ProPlus Enrollment ID: 58313261

Parent Program: 75434048

Сублицензионный договор с ООО «СОФТЛАЙН ПРОЕКТЫ» от 23.10.2017 № 180/17-Д

2. Программа «Защита образования» компании «Лаборатория Касперского» Соглашение № 1CE0151102071341

Договор на оказание услуг по продлению техподдержки бессрочных академических лицензий с ООО «ПОЛИКОМ ПРО» от 23.10.2017 № 182/17-Д

3. Программное обеспечение «Антиплагиат.ВУЗ» Лицензионный договор с ЗАО «Анти-Плагат» от 26.03.2018 № 170

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

Для изучения курса требуется лекционная аудитория с доской и средствами рисования на ней, а также предоставляющая возможность демонстрации компьютерных презентаций.

Для выполнения лабораторных работ:

стол для микроскопирования НВ-1500 см; стол островной химический НВ-1500 ОПХ; стол передвижной НВ-600 СТП; стол пристенный физический НВ-1500ПК; стол-мойка НВ-1000 МО с сушилкой, двойная раковина из полипропилена; стол для титрования НВ-1400ТП; шкаф вытяжной НВ-1400 ШВп; шкаф для химических реактивов НВ-400 ШР-В односекционный с вытяжным патрубком; блок вытяжной встраиваемый БВ-1; весы электронные НР-60; весы электронные НЛ-100; сушильный шкаф СНОЛ 24/200 стальной; дистиллятор ДЭ-10; водяная баня; печь лабораторная ПМ-10М; центрифуга лабораторная ОЛЦ-3п; термостат; химическая посуда

## 11. Критерии оценивания и оценочные средства

### 11.1. Критерии оценивания

Для дисциплины «Вычислительная химия» формой аттестации является экзамен. Оценивание качества освоения дисциплины производится в свободной форме.

#### Экзамен

Оценка	Описание
неудовлетворительно	ответ на вопрос отсутствует или в целом не верен.
удовлетворительно	вопрос раскрыт не полно, присутствуют грубые ошибки, однако есть некоторое понимание раскрываемых понятий.
хорошо	вопрос раскрыт, однако нет полного описания всех необходимых элементов.
отлично	вопрос раскрыт полностью, точно обозначены основные понятия и характеристики по теме.

Оценка «неудовлетворительно» - студент показывает недостаточные знания программного материала, не способен аргументировано и последовательно его излагать, допускаются грубые ошибки в ответах, неправильно отвечает на поставленный вопрос или затрудняется с ответом.

Оценка «удовлетворительно» - студент показывает достаточные, но не глубокие знания программного материала; при ответе не допускает грубых ошибок или противоречий, однако в формулировании ответа отсутствует должная связь между анализом, аргументацией и выводами. Для получения правильного ответа требуется уточняющие вопросы.

Оценка «хорошо» - студент показывает глубокие знания программного материала, грамотно его излагает, достаточно полно отвечает на поставленный вопрос и дополнительные вопросы, умело формулирует выводы. В тоже время при ответе допускает несущественные погрешности.

Оценка «отлично» - студент показывает полные и глубокие знания программного материала, логично и аргументировано отвечает на поставленный вопрос, а также дополнительные вопросы, показывает высокий уровень теоретических знаний.

## **11.2. Оценочные средства**

Оценочные средства по дисциплине представлены в фонде оценочных средств, который является резервной частью основной образовательной программы и размещается в электронной информационно-образовательной среде СПбПУ на портале [etk.spbstu.ru](http://etk.spbstu.ru)

## **12. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины**

На лекциях преподаватель анализирует наиболее сложные проблемы курса. Программа курса нацелена на развитие у студента навыков научного мышления. Она предполагает знакомство с методами научного эксперимента, его анализа, обобщения и построения математической модели, позволяющей аппроксимировать полученные результаты.

Работа студентов на практических занятиях позволяет им больше познакомиться с методологией научного эксперимента, обработки и анализа полученных данных, а также заставляет учащихся заниматься самостоятельным изучением литературы по курсу «Вычислительная химия» и обеспечивает более активное и творческое отношение к выбору дальнейшего направления своих профессиональных интересов.

Формой итогового контроля является экзамен. Подготовка к нему позволяет студентам систематизировать и обобщать все знания, умения и навыки, полученные в ходе изучения курса. Предполагаемый практикум призван помочь им в этом.

Подготовка к текущим практическим занятиям осуществляется в процессе самостоятельной работы студентов согласно методическим указаниям, представляемым преподавателем на предшествующих занятиях.

## **13. Адаптация рабочей программы для лиц с ОВЗ**

Адаптированная программа разрабатывается при наличии заявления со стороны обучающегося (родителей, законных представителей) и медицинских показаний (рекомендациями психолого-медико-педагогической комиссии). Для инвалидов адаптированная образовательная программа разрабатывается в соответствии с индивидуальной программой реабилитации.