

**АННОТАЦИИ ПРОГРАММ УЧЕБНЫХ ДИСЦИПЛИН
подготовки бакалавра по направлению 020100.62 Химия**

**ЦИКЛ ОБЩИХ МАТЕМАТИЧЕСКИХ И ЕСТЕСТВЕННО-НАУЧНЫХ ДИСЦИПЛИН
ВАРИАТИВНАЯ ЧАСТЬ:**

Компьютерная химия

Цели и задачи дисциплины

Цель дисциплины – познакомить студентов с возможностями математического моделирования в химии, его применения для решения химических задач и привить им навыки работы с соответствующим программным обеспечением.

Задачи дисциплины:

- научить студентов применению методов математического моделирования для решения химических задач.

Студенты, завершившие изучение данной дисциплины, должны:

– **знать:**

- о компьютерной химии как прикладной области квантовой химии и ее роли в современной химии;
- теоретические основы методов молекулярной механики, молекулярной динамики и квантовой химии;
- о границах применимости различных методов компьютерной химии.

– **уметь:**

- работать с компьютерными программами, в которых реализованы расчетные методы компьютерной химии;
- решать типичные задачи математического моделирования в химии с использованием прикладных программ компьютерной химии.

– **быть способным:**

- использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания в области компьютерной химии;
- в условиях развития науки и техники к критической переоценке накопленного опыта и творческому анализу своих возможностей;
- использовать полученные навыки работы для решения профессиональных и социальных задач.

7 семестр, зачет

Всего 100 часов, аудиторных 50

Краткое содержание

Основы молекулярной механики. Понятие силового поля, его составляющие. Виды силовых полей. Особенности параметризации в различных силовых полях. Методы оптимизации геометрических параметров химической системы. Применение методов молекулярной механики для расчета физико-химических характеристик молекул и молекулярных фрагментов.

Методы молекулярной динамики. Основные особенности математической модели и объекты исследования. Проблема эргодичности. Основные варианты стратегии проведения расчетов. Оценка степени достижения системой термодинамического равновесия. Предсказательные возможности методов молекулярной динамики.

Неэмпирические методы расчета молекулярных систем. Неэмпирические методы: основные принципы, области применения, достоинства и недостатки. Базисные наборы атомных орбиталей. Энергия электронной корреляции.

Полуэмпирические методы расчета молекулярных систем. Полуэмпирические методы: основные принципы, области применения, достоинства и недостатки. Различные параметризации полуэмпирических методов.

Пакеты программ, используемые в компьютерной химии. Основные составляющие и возможности различных программ. Принципы создания образов молекул и работа с ними. Реализация методов квантовой химии, молекулярной механики и молекулярной динамики в различных программах.