

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Компьютерная графика в органической химии БЗ.ДВ.1

Направление подготовки: 020100.62 - Химия

Профиль подготовки: Органическая химия

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Курбангалиева А.Р.

Рецензент(ы):

Седов И.А.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Антипин И. С.

Протокол заседания кафедры No ____ от "____" _____ 201__г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ____ от "____" _____ 201__г

Регистрационный No 7115

Казань
2014

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) доцент, к.н. (доцент) Курбангалиева А.Р. Кафедра органической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова, Almira.Kurbangalieva@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины "Компьютерная графика в органической химии" является знакомство с популярными химическими пакетами программных средств Chem & Bio Office фирмы CambridgeSoft Corporation, HyperChem фирмы Hypercube Inc., GaussView Gaussian Inc., предназначенных для создания и редактирования двумерных и трехмерных моделей органических молекул. Коротко рассматриваются теоретические вопросы компьютерного моделирования в химии и применение программ для визуализации пространственной структуры химических соединений, прогнозирования их физико-химических свойств и проведения расчетов методами квантовой химии и молекулярной механики.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел "Б3.ДВ.1 Профессиональный" основной образовательной программы 020100.62 Химия и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 4 курсе, 7 семестр.

Данная учебная дисциплина включена в раздел Б3."Цикл профессиональных дисциплин" (курс по выбору). Осваивается на четвертом курсе (7 семестр).

Знания и навыки, приобретенные обучающимися в результате освоения дисциплины "Компьютерная графика в органической химии" необходимы для дальнейшего освоения дисциплин "Электронная структура органических соединений", "ЯМР-спектроскопия: анализ спиновых систем", "Практический курс ЯМР-спектроскопии". Практические навыки и умения на персональном компьютере с применением популярных химических программ будут использованы студентами для представления результатов научно-исследовательской работы на конференциях, отчетах и защитах квалификационных работ.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-1 (профессиональные компетенции)	понимает сущность и социальную значимость профессии, основных перспектив и проблем, определяющих конкретную область деятельности

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

принципы компьютерного графического изображения химических формул соединений и реакций;

общий интерфейс программных средств, предназначенных для научных исследований.

2. должен уметь:

ориентироваться и использовать функциональные возможности графических программ для представления научных результатов.

3. должен владеть:

навыками работы с компьютерными изображениями сложных органических структур и теоретическими знаниями о молекулярном моделировании структуры органических соединений

4. должен демонстрировать способность и готовность:

использовать возможности современных программных средств для визуализации, представления и анализа результатов теоретических и экспериментальных исследований

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 7 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Основные понятия компьютерной графики и компьютерного моделирования в органической химии.	7	1	0	4	0	
2.	Тема 2. "Химический редактор" CS Chem & Bio Draw 12.0 как средство создания двумерных изображений молекулярных структур и их редактирования	7	2-6	0	12	0	контрольная работа
3.	Тема 3. Программа CS Chem & Bio 3D 12.0 для визуализации химических соединений, компьютерного моделирования и расчетов.	7	7-8	0	6	0	

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
4.	Тема 4. Программа GaussView 5 для визуализации химических соединений, компьютерного моделирования и расчетов.	7	9-10	0	6	0	
5.	Тема 5. Программный пакет молекулярного моделирования HyperChem.	7	11-14	0	8	0	
6.	Тема 6. Программа MestReNova для обработки, построения и анализа данных ядерного магнитного резонанса.	7	15-17	0	6	0	контрольная работа
	Тема . Итоговая форма контроля	7		0	0	0	зачет
	Итого			0	42	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Основные понятия компьютерной графики и компьютерного моделирования в органической химии.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Принципы графического изображения химических формул в органической химии. Современные пакеты программ для изображения химических формул и уравнений реакций. Требования программ к операционным системам. Совместимость программ с Microsoft Office.

Тема 2. "Химический редактор" CS Chem & Bio Draw 12.0 как средство создания двумерных изображений молекулярных структур и их редактирования

практическое занятие (12 часа(ов)):

Интегрированный программный комплекс Chem & Bio Office: назначение и возможности. Запуск программы CS Chem & Bio Draw 12.0. Открытие файлов с разным расширением. Пользовательский интерфейс программы. Обзор важнейших элементов главной и контрольной панелей. Инструменты выделения и масштабирования, рисование мышью. Инструменты изображения связей и химических символов в программе CS Chem & Bio Draw 12.0. Преобразование структур: поворот, отображение, клонирование. Использование шаблонов. Написание схем химических реакций.

Тема 3. Программа CS Chem & Bio 3D 12.0 для визуализации химических соединений, компьютерного моделирования и расчетов.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Основные принципы работы. Графический интерфейс программы CS Chem & Bio 3D 12.0 (окно модели, строка состояния, панель вращения, заголовок окна, строка меню, панель масштабирования, набор инструментов для создания модели). Создание и редактирование трехмерных моделей химических соединений (создание углеродного остова, введение гетероатома в модель, дополнительные функции). Описание процедуры проведения квантово-химических расчетов в программе CS Chem & Bio 3D 12.0 (поиск минимума энергии модели, расчет свойств молекул).

Тема 4. Программа GaussView 5 для визуализации химических соединений, компьютерного моделирования и расчетов.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Gauss View ? как наиболее продвинутый и мощный графический интерфейс для популярной программы квантово-химических расчетов Gaussian. Импорт и построение молекулярных структур, задача исходных параметров и запуск расчетов в Gaussian, просмотр и анализ полученных результатов. Исследование молекулярных структур. Вращение, перемещение и масштабирование в 3D-режиме с помощью операций мышью и специальной панели опций, доступных на каждом графическом экране. Наблюдение численного значения для любого структурного параметра. Использование различных синхронизированных и независимых ракурсов для просмотра одной и той же структуры. Манипулирование отдельными структурами и целыми ансамблями структур. Форматы представления изображений структур: проволоочный каркас, трубки, шары и стержни/связи, заполненный пространственный стиль. Отображение стереохимической информации. Подсветка, отображение или скрытие атомов.

Тема 5. Программный пакет молекулярного моделирования HyperChem.

практическое занятие (8 часа(ов)):

Пользовательский интерфейс. Главное окно и использование мыши. Клавиатурные альтернативы и кратчайшие пути программы HyperChem. Открытие файла и установки отображения структур. Создание и редактирование молекулярной модели, определение ее геометрических параметров. Описание процедуры проведения квантово-химических расчетов в программе HyperChem.

Тема 6. Программа MestReNova для обработки, построения и анализа данных ядерного магнитного резонанса.

практическое занятие (6 часа(ов)):

Обработка данных ЯМР экспериментов на персональном компьютере с помощью программы MestReNova. Графический интерфейс программы. Основные принципы и этапы обработки данных: взвешивающие функции и аподизация, дополнение нулями, быстрое преобразование Фурье, фазовая коррекция и источники фазовых ошибок, коррекция базовой линии спектра. Преобразование объектов различных форматов. Обработка и отображение спектров, аналитические возможности, интегрирование, частотные метки. Измерение констант спин-спинового взаимодействия, обработка мультиплетов.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
2.	Тема 2. "Химический редактор" CS Chem & Bio Draw 12.0 как средство создания двумерных изображений молекулярных структур и их редактирования	7	2-6	подготовка к контрольной работе	12	контрольная работа
6.	Тема 6. Программа MestReNova для обработки, построения и анализа данных ядерного магнитного резонанса.	7	15-17	подготовка к контрольной работе	18	контрольная работа
	Итого				30	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Тренинг в компьютерном классе.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Основные понятия компьютерной графики и компьютерного моделирования в органической химии.

Тема 2. "Химический редактор" CS Chem & Bio Draw 12.0 как средство создания двумерных изображений молекулярных структур и их редактирования

контрольная работа , примерные вопросы:

Образец заданий контрольной работы "Химический редактор" CS Chem & Bio Draw 12.0 как средство создания двумерных изображений молекулярных структур и их редактирования. 1. Пользуясь программой CS Chem & Bio Draw 12.0 изобразите проекции Ньюмена различных конформационных изомеров 2-метилбутана, расположенные в порядке увеличения их энергии. 2. Сколько геометрических изомеров и сколько конформеров (если они есть) имеет гептадиен-2,4? Нарисуйте эти пространственные изомеры с помощью программы CS Chem & Bio Draw 12.0 и укажите, какие из них будут наименее устойчивыми и какие наиболее устойчивыми. 3. Изобразите с помощью программы CS Chem & Bio Draw 12.0 проекционные формулы Фишера и определите абсолютную конфигурацию центров хиральности следующих соединений: а) 2-хлорпентана; б) 2-метил-3-хлорпентана; в) 3-метил-3-хлорпентана; г) 2-метил-1-хлорбутана; д) 3-хлоргексана; е) 3-хлорпентена-1; ж) метил-этил-н-пропилизопропилметана; з) $C_6H_5CH(CH_3)NH_2$; и) яблочной кислоты $HOOCCH_2CH(OH)COOH$; к) аланина $CH_3CH(NH_2)COOH$; л) миндальной кислоты $C_6H_5CH(OH)COOH$. 4. Изобразите с помощью программы CS Chem & Bio Draw 12.0 все резонансные структуры, описывающие строение метилформиата, аллил-катиона, ацетат-иона. Опишите делокализацию электронов указанных соединений одной структурной формулой, дополненной изогнутыми стрелками. 5. Изобразите с помощью программы CS Chem & Bio Draw 12.0 геометрическое строение следующих молекулярных систем: H_2CS , SeF_4 , $PO(CH_3)_3$, CH_3SSCH_3 , $HC(O)N(CH_3)_2$, $(CH_3)_2PF_3$, которое можно предсказать, пользуясь концепцией отталкивания валентных электронных пар. Оцените примерное значение валентных углов в этих соединениях и отразите это на рисунках. 6. Пользуясь программой CS Chem & Bio Draw 12.0 напишите схемы реакций диенового синтеза между следующими веществами: а) изопрен и кротоновый альдегид ($CH_3-CH=CH-CHO$), б) дивинил и малеиновый ангидрид, в) изопрен и акрилонитрил ($CH_2=CHCN$). 7. Изобразите схематично с помощью программы CS Chem & Bio Draw 12.0 цепочку превращений, взяв в качестве исходного вещества метилэтилкарбинол и последовательно действуя на него PCl_5 , спиртовым раствором едкого кали, бромом, повторно спиртовым раствором KOH (2 моля), H_2O (Hg^{2+} , H^+).

Тема 3. Программа CS Chem & Bio 3D 12.0 для визуализации химических соединений, компьютерного моделирования и расчетов.

Тема 4. Программа GaussView 5 для визуализации химических соединений, компьютерного моделирования и расчетов.

Тема 5. Программный пакет молекулярного моделирования HyperChem.

Тема 6. Программа MestReNova для обработки, построения и анализа данных ядерного магнитного резонанса.

контрольная работа , примерные вопросы:

Образец заданий контрольной работы Программы для компьютерного моделирования молекул. Программа MestReNova для обработки, построения и анализа данных ядерного магнитного резонанса. 1. Используя программу HyperChem создайте молекулярную трехмерную модель следующих соединений: а) тетраметилметана, б) метилового эфира уксусной кислоты, в) бензальдегида, г) диметилсульфата. Используйте вариант представления трехмерной модели ?Стержни и точки? (Sticks&dots). Определите основные геометрические параметры полученной модели. 2. Используя программу CS Chem & Bio 3D 12.0 создайте молекулярную трехмерную модель следующих соединений: а) гидразина NH_2NH_2 , б) диметилдисульфида CH_3SSCH_3 , в) гексафенилбензола $(\text{C}_6\text{H}_5)_6\text{C}_6$. Используйте вариант представления трехмерной модели ?Шары и стержни? (Ball&Stick). Определите основные геометрические параметры полученной модели. 3. Используя программу GaussView 5 создайте молекулярную трехмерную модель следующих соединений: а) CH_3PH_2 , б) $\text{C}_6\text{H}_5\text{PH}_2$, в) $(\text{CH}_3)_2\text{PC}\equiv\text{N}$. Сопоставьте длины связей углерод ? фосфор в этих соединениях. Используйте вариант представления трехмерной модели ?Ball & Bond Type?. 4. С помощью программы MestReNova проведите обработку спектра ЯМР ^1H , отобразите на спектре химические сдвиги и интегральные интенсивности сигналов. Обработайте мультиплеты в отдельном окне, указав константы спин-спинового взаимодействия.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

Вопросы к зачету:

1. Основные понятия компьютерной графики и компьютерного моделирования в органической химии. Принципы графического изображения химических формул в органической химии.
2. Современные пакеты программ для изображения химических формул и уравнений реакций. Требования программ к операционным системам. Совместимость программ с Microsoft Office.
3. "Химический редактор" CS Chem & Bio Draw 12.0: назначение и возможности. Запуск программы CS Chem & Bio Draw 12.0. Открытие файлов с разным расширением. Пользовательский интерфейс программы.
4. "Химический редактор" CS Chem & Bio Draw 12.0. Обзор важнейших элементов главной и контрольной панелей. Инструменты выделения и масштабирования, рисование мышью. Инструменты изображения связей и химических символов в программе CS Chem & Bio Draw 12.0.
5. "Химический редактор" CS Chem & Bio Draw 12.0. Преобразование структур: поворот, отображение, клонирование. Использование шаблонов. Написание схем химических реакций.
6. Программа CS Chem & Bio 3D 12.0 для визуализации химических соединений, компьютерного моделирования и расчетов. Основные принципы работы. Графический интерфейс программы CS Chem & Bio 3D 12.0 (окно модели, строка состояния, панель вращения, заголовок окна, строка меню, панель масштабирования, набор инструментов для создания модели).
7. Программа CS Chem & Bio 3D 12.0. Создание и редактирование трехмерных моделей химических соединений (создание углеродного остова, введение гетероатома в модель, дополнительные функции). Описание процедуры проведения квантово-химических расчетов в программе CS Chem & Bio 3D 12.0 (поиск минимума энергии модели, расчет свойств молекул).
8. Программа Gauss View 5 для визуализации химических соединений, компьютерного моделирования и расчетов. Импорт и построение молекулярных структур, задача исходных параметров и запуск расчетов в Gaussian, просмотр и анализ полученных результатов. Исследование молекулярных структур.
9. Программа Gauss View 5. Вращение, перемещение и масштабирование в 3D-режиме с помощью операций мышью и специальной панели опций, доступных на каждом графическом экране. Наблюдение численного значения для любого структурного параметра.

10. Программа Gauss View 5. Использование различных синхронизированных и независимых ракурсов для просмотра одной и той же структуры. Манипулирование отдельными структурами и целыми ансамблями структур. Форматы представления изображений структур: проволочный каркас, трубки, шары и стержни/связи, заполненный пространственный стиль. Отображение стереохимической информации. Подсветка, отображение или скрытие атомов.
11. Программный пакет молекулярного моделирования HyperChem. Пользовательский интерфейс. Главное окно и использование мыши. Клавиатурные альтернативы и кратчайшие пути программы HyperChem. Открытие файла и установки отображения структур.
12. Программный пакет молекулярного моделирования HyperChem. Создание и редактирование молекулярной модели, определение ее геометрических параметров. Описание процедуры проведения квантово-химических расчетов в программе HyperChem.
13. Программа MestReNova для обработки, построения и анализа данных ядерного магнитного резонанса. Обработка данных ЯМР экспериментов на персональном компьютере с помощью программы MestReNova. Графический интерфейс программы. Основные принципы и этапы обработки данных: взвешивающие функции и аподизация, дополнение нулями, быстрое преобразование Фурье, фазовая коррекция и источники фазовых ошибок, коррекция базовой линии спектра. Преобразование объектов различных форматов.
13. Программа MestReNova. Обработка и отображение спектров, аналитические возможности, интегрирование, частотные метки. Измерение констант спин-спинового взаимодействия, обработка мультиплетов.

Задачи к зачету в графическом формате включены в программу дисциплины в качестве приложения.

7.1. Основная литература:

1. Чмутова, Г.А. Аспекты связи "Строение - реакционная способность": учебное пособие / Г. А. Чмутова; Казан. (Приволж.) федер. ун-т, Хим. ин-т. - Казань: [Казанский (Приволжский) федеральный университет], 2010. - 93 с.
2. Введение в хемоинформатику, Компьютерное представление химических структур: учебное пособие / Т. И. Маджидов [и др.]. - Казань: Казанский университет, 2013. - 173 с.
3. Гвоздева В. А. Базовые и прикладные информационные технологии: Учебник / В.А. Гвоздева. - М.: ИД ФОРУМ: НИЦ ИНФРА-М, 2014. - 384 с.
<http://znanium.com/bookread.php?book=428860>
4. Федотова Е. Л. Прикладные информационные технологии: Учебное пособие / Е.Л. Федотова, Е.М. Портнов. - М.: ИД ФОРУМ: НИЦ ИНФРА-М, 2013. - 336 с.:
<http://znanium.com/bookread.php?book=392462>

7.2. Дополнительная литература:

1. Бутырская Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView. [Электронный ресурс] - М.: Солон-Пресс, 2011. - 220 с.
<http://www.bibliorossica.com/book.html?currBookId=10448&>
2. Исакова О.П., Тарасевич Ю.Ю., Юзюк Ю.И. Обработка и визуализация данных физических экспериментов с помощью пакета Origin - М: Книжный дом "ЛИБКОМ", 2009. - 136 с.
3. Быкова, В. В. Искусство создания базы данных в Microsoft Office Access 2007 [Электронный ресурс] : Учеб. пособие / В. В. Быкова. - Красноярск: Сиб. федер. ун-т, 2011. - 260 с.
<http://znanium.com/bookread.php?book=443138>

7.3. Интернет-ресурсы:

- Руководство пользователя программы ?CS Chem & Bio Draw 12.0? -
<http://www.cambridgesoft.com/services/desktopsupport/documentation/manuals/files/chembiodraw.pdf>
- Руководство пользователя программы ?CS Chem & Bio 3D 12.0? -
<http://www.cambridgesoft.com/services/DesktopSupport/Documentation/Manuals/files/ChemBio3dV12.pdf>

Руководство пользователя программы ?GaussView 5? -

http://www.gaussian.com/g_tech/gv5ref/gv5ref_toc.htm

Руководство пользователя программы ?HyperChem 7? -

http://www.chemistry-software.com/pdf/hyperchem_getting_started.pdf

Руководство пользователя программы ?MestReNova? -

http://mestrelab.com/downloads/manuals/MestReNova-8.1.0_Manual.pdf

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Компьютерная графика в органической химии" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

Лекционные и практические занятия по дисциплине "Компьютерная графика в органической химии" проводятся в компьютерном классе химического корпуса КФУ (аудитория 425), в котором размещен вычислительный кластер Химического института им. А.М. Бутлерова КФУ.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 020100.62 "Химия" и профилю подготовки Органическая химия .

Автор(ы):

Курбангалиева А.Р. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Седов И.А. _____

"__" _____ 201__ г.