Министерство просвещения Российской Федерации

Государственное бюджетное профессиональное образовательное учреждение

Московской области «Волоколамский аграрный техникум «Холмогорка»

(ГБПОУ МО «ВАТ «Холмогорка»)

Конкурс “NEW PROJECT” 2024/2025

**ИНДИВИДУАЛЬНЫЙ ПРОЕКТ**

**По учебной дисциплине**

**Химия**

**На тему «Компьютерная химия»**

**Выполнила**: Новикова Юлианна Анатольевна,

студентка 2 курса по специальности

09.02.07 Информационные системы и

программирование

**Руководитель:**

преподаватель: Никифорова Светлана Александровна

2024

**Оглавление**

[**ВВЕДЕНИЕ** 3](#_Toc184930267)

[**ГЛАВА I. КОМПЬЮТЕРАЯ ХИМИЯ** 5](#_Toc184930268)

[**1.1** **ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОМПЬЮТЕРНОЙ ХИМИИ И ПРИМЕНЕНИЕ КОМПЬЮТЕРНОЙ ХИМИИ В СОВРЕМЕННОЙ НАУКЕ** 5](#_Toc184930269)

[**1.2 МОДЕЛИРОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР** 6](#_Toc184930270)

[**1.3. ВИРТУАЛЬНОЕ СКРИНИНГОВАНИЕ** 7](#_Toc184930271)

[**1.4 ДИЗАЙН И ОПТИМИЗАЦИЯ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ** 8](#_Toc184930272)

[**1.5. ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ХИМИИ** 9](#_Toc184930273)

[**ГЛАВА** **II.ПРАКТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ** 12](#_Toc184930274)

[**2.1 ЧАТ-БОТ** 12](#_Toc184930275)

[**2.2 СОЗДАНИЕ ЧАТ-БОТА** 12](#_Toc184930276)

[**ЗАКЛЮЧЕНИЕ** 14](#_Toc184930277)

[**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ** 15](#_Toc184930278)

# **ВВЕДЕНИЕ**

Компьютерная химия представляет собой многогранную область исследований, которая объединяет знания из области химии, информатики и математики для изучения химических систем с использованием компьютерных методов и симуляций.

Одним из ключевых аспектов компьютерной химии является возможность моделирования и изучения молекулярных структур, химических реакций и физико-химических свойств веществ на компьютере. С помощью специальных программных инструментов и методов расчета ученые могут исследовать поведение и взаимодействия атомов и молекул в различных условиях, что позволяет предсказывать свойства веществ и химические реакции.

Компьютерная химия также оказывает важное влияние на развитие методов исследования химических процессов. Использование компьютерных методов позволяет ученым лучше понять фундаментальные законы химии, предсказывать реакционные способности новых молекул и разрабатывать более эффективные методы синтеза химических соединений.

Данная тема была выбрана из-за интереса к химии и ее взаимодействие с компьютерными методами и алгоритмами. А также, потому что компьютерная химия - это относительно новая, но быстроразвивающаяся область, которая имеет большой потенциал

**Актуальность:** В наше время компьютерная химия становится все более важной и востребованной благодаря скорому развитию вычислительных технологий и их возросшей доступности. Эта область находится на стыке нескольких дисциплин, таких как химия, информатика и математика, и предоставляет широкие возможности для исследования и моделирования химических систем.

В сфере фармацевтики компьютерная химия играет ключевую роль. Использование компьютерных методов позволяет ускорить процесс разработки новых лекарственных препаратов, выявлять потенциальные молекулы-кандидаты для новых препаратов и проводить виртуальное скрининговое тестирование на безопасность и эффективность. Это помогает сократить время и затраты, необходимые для разработки новых лекарств.

И наконец, компьютерная химия имеет широкий потенциал применения в области биохимии, экологии, материаловедения и различных технологических отраслях. Использование компьютерных методов моделирования и анализа позволяет более глубоко понять сложные химические системы, что открывает новые возможности в различных областях прикладной науки.

Одной из ключевых актуальных проблем, которую решает компьютерная химия, является разработка новых материалов. С помощью компьютерных методов моделирования ученые могут предсказывать свойства и поведение различных материалов без необходимости их физического создания и испытаний. Это позволяет значительно сократить время и расходы на исследования, а также создавать материалы с определенными требуемыми свойствами, что наиболее актуально в области разработки новых материалов для промышленных и научных целей.

**Цели:** Изучить и проанализировать применение компьютерной химии в различных областях, а также разобраться в моделирование и изучение химических процессов с помощью него.

**Задачи:** Ознакомиться с методами и инструментами компьютерной химии. Разобраться в её преимуществах и ограничениях.

**Методы исследования:** аналитический обзор

**Объект исследования:** химические реакции, молекулярные структуры, свойства веществ и другие химические явления.

**Предмет исследования:** влияние компьютерной химииииспользование компьютерных методов для анализа, прогнозирования и оптимизации химических процессов.

# **ГЛАВА I. КОМПЬЮТЕРАЯ ХИМИЯ**

# **ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОМПЬЮТЕРНОЙ ХИМИИ И ПРИМЕНЕНИЕ КОМПЬЮТЕРНОЙ ХИМИИ В СОВРЕМЕННОЙ НАУКЕ**

Компьютерная химия – это научная дисциплина, которая использует методы компьютерного моделирования и вычислительной химии для изучения и предсказания химических свойств и реакций веществ. Компьютерная химия помогает ученым понять молекулярные процессы, проектировать новые молекулярные соединения и материалы, оптимизировать химические реакции и разрабатывать новые методы для исследования химических систем.

Компьютерная химия имеет широкое применение в современной науке и индустрии. Ее основные области применения включают:

1. Разработка новых химических соединений и материалов: Компьютерные модели помогают предсказать свойства и структуру новых соединений, что позволяет сократить время и затраты на их исследование и синтез.

 2. Фармацевтическая промышленность: Компьютерная химия используется для разработки новых лекарственных средств, предсказания их воздействия на организм, и оптимизации химических процессов при производстве лекарств.

3. Материаловедение: Компьютерные модели позволяют изучать свойства различных материалов, включая полупроводники, полимеры, металлы, и создавать материалы с желаемыми свойствами.

4. Электроника и нанотехнологии: Компьютерная химия применяется для моделирования свойств наночастиц, разработки новых материалов для наноэлектроники и нанофотоники.

5. Окружающая среда: Компьютерное моделирование используется для изучения взаимодействия химических веществ с окружающей средой, предсказания экотоксикологических свойств и оценки рисков

Эти и другие области современной науки и промышленности используют компьютерную химию для решения широкого круга задач, связанных с химическими процессами и свойствами веществ

В целом, компьютерная химия является мощным инструментом для исследования и оптимизации химических систем. Она позволяет сэкономить время и ресурсы, улучшить качество и эффективность процессов и способствует развитию науки и промышленности.

# **1.2 МОДЕЛИРОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР**

Молекулярное моделирование – метод компьютерной химии, использующий математические модели и алгоритмы для изучения и предсказания свойств и поведения молекул. С его помощью можно визуализировать и анализировать структуру молекул, исследовать их взаимодействия и реакции.

Квантово-химические расчеты в компьютерной химии основаны на принципах квантовой механики и позволяют анализировать электронные структуры, энергии и свойства молекул. Основные аспекты:

1) Подходы к решению уравнения Шредингера
2) Типы квантово-химических методов
3) Расчет энергии и геометрии молекул
4) Программные пакеты для расчетов

Методы молекулярной динамики (МД) моделируют движение атомов и молекул в пространстве с течением времени, исследуя динамику молекулярных систем на микроскопическом уровне. Ключевые аспекты:

1. Интегрирование уравнений движения
2. Моделирование силовых взаимодействий
3. Оптимизация параметров
4. Анализ результатов

Программные пакеты для моделирования молекулярных структур включают Gaussian, VMD (Visual Molecular Dynamics), CHARMM (Chemistry at Harvard Macromolecular Mechanics) и GROMACS. Выбор зависит от целей и задач исследования.

# **1.3. ВИРТУАЛЬНОЕ СКРИНИНГОВАНИЕ**

Виртуальный скрининг — это метод компьютерного моделирования для поиска потенциально активных молекул, которые могут быть использованы в качестве лекарственных средств. Этот метод позволяет анализировать большие базы данных молекул и выявлять перспективные для разработки лекарств.

Процесс виртуального скрининга включает несколько этапов. Исследователи определяют биохимическую цель или белок, с которым молекулы должны взаимодействовать. Затем проводится докинг-стадия, где программы моделируют взаимодействие между молекулами и целью. После докинга проводится анализ результатов для оценки активности молекул и выбора перспективных для дальнейших исследований.

Виртуальный скрининг ускоряет поиск новых лекарств, повышает эффективность исследований в фармакологии и медицине, и открывает новые перспективы для инновационных препаратов.

Программы для виртуального скрининга позволяют проводить виртуальные эксперименты на компьютере, оптимизировать молекулярные структуры и предсказывать свойства. Программы используют алгоритмы и методы для взаимодействия с молекулами, докинговых расчетов, анализа взаимодействий и оценки свойств. Они обычно работают с базами данных молекул и имеют графический интерфейс для удобства пользователя.

Известные программы для виртуального скрининга включают AutoDock, CHARMM, Vina, Glide, GOLD, FlexX и другие. Каждая программа имеет уникальные возможности и ускоряет поиск лекарств, снижает затраты на исследования и улучшает вероятность успешного создания препарата. Виртуальный скрининг также помогает обнаружить новые молекулы для лечения различных заболеваний.

Таким образом, виртуальный скрининг играет важную роль в поиске новых лекарств и способствует развитию фармацевтической индустрии и медицины в целом.

# **1.4 ДИЗАЙН И ОПТИМИЗАЦИЯ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ**

Компьютерное моделирование для дизайна новых соединений — это процесс создания и анализа моделей химических соединений с использованием специализированного программного обеспечения. Для начала процесса необходимо определить цель исследования и выбрать программу для моделирования, затем создать трехмерную структуру молекулы соединения, включающую информацию о расположении атомов и связях между ними. После создания модели проводится анализ свойств молекулы и взаимодействий с другими соединениями, прогнозируя поведение соединения в различных условиях. Компьютерное моделирование также позволяет оптимизировать структуру соединения для повышения стабильности, улучшения реакционных свойств или уменьшения токсичности, что особенно полезно при разработке новых лекарственных препаратов, материалов или катализаторов. Компьютерное моделирование сокращает время и затраты на исследования, повышает эффективность и точность их результатов.

Программное обеспечение для оптимизации химических соединений обычно предлагает следующие возможности: определение молекулярных свойств, поиск структур, оптимизация структуры, визуализация, анализ данных

Существует два основных типа программного обеспечения для оптимизации химических соединений:

· На основе квантовой химии: Использует квантово-механические расчеты для определения молекулярных свойств и оптимизации структур.
На основе молекулярной механики: Использует классические силовые поля для моделирования молекулярных взаимодействий и оптимизации структур.

Программное обеспечение используется для решения задач, включая разработку лекарств, материаловедение, химическое производство, агрохимию.

Примеры программного обеспечения

Некоторые популярные примеры: Gaussian, ORCA, VASP, LAMMPS, Materials Studio.

Используется для разработки различных типов материалов: структурных, функциональных, биоматериалов, энергетических.

# **1.5. ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ХИМИИ**

Базы данных и информационные системы играют важную роль в химии, предоставляя доступ к огромным объемам информации.

Существует множество типов химических баз данных:

* Структурные базы данных
* Базы данных свойств
* Базы данных реакций
* Базы данных литературы

Информационные системы объединяют базы данных и другие ресурсы для удобного доступа. Применение:

* Поиск информации
* Проектирование экспериментов
* Анализ данных
* Предсказание свойств
* Разработка новых материалов

Примеры химических баз данных и информационных систем:

* PubChem: база данных о химических веществах и их свойствах
* SciFinder: доступ к химической литературе и базам данных
* ChemSpider: база данных о химических структурах и свойствах
* NIST Chemistry WebBook: термодинамические и спектроскопические данные

Основные компьютерные методы анализа химических данных:

* Хемометрия
* Молекулярное моделирование
* Квантово-химические расчеты
* Машинное обучение
* Визуализация данных

Машинное обучение играет все более значимую роль в сфере химических исследований, поскольку позволяет обрабатывать и анализировать большие объемы данных, идентифицировать закономерности и прогнозировать свойства химических соединений. Некоторые области применения машинного обучения в химических исследованиях включают:

* Прогнозирование свойств соединений
* Виртуальный скрининг
* Прогнозирование реакционной активности
* Анализ спектроскопических данных
* Оптимизация химических синтезов

Машинное обучение ускоряет и улучшает химические исследования, способствует разработке эффективных и безопасных химических продуктов и процессов.

Машинное обучение открывает новые возможности для ускорения и улучшения химических исследований, что способствует развитию более эффективных и безопасных химических продуктов и процессов.

# **ГЛАВА** **II.ПРАКТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ**

# **2.1 ЧАТ-БОТ**

Чат-бот – это специально разработанная программа, которая имитирует общение людей и предназначена поддерживать ситуативный диалог с пользователем. Используется на сайтах, в мессенджерах, социальных сетях для автоматических ответов на ряд вопросов без участия людей. Как правило, чат-бот программируют для ответов на самые частые вопросы и выполнение типовых действий.

Простыми словами, это виртуальный помощник с искусственным интеллектом для разных целей. По запросу пользователя он может вызвать такси, заказать билет на мероприятие, найти что-то в поисковике или ответить на вопрос.

Главная ценность чат-бота – возможность выполнить первичную обработку запроса. Чат-боты всегда на связи и отвечают на обращение сразу же, как только оно поступит, собрать необходимую информацию или статистику, предложить решение. Все это - в рамках политики конфиденциальности, строго соблюдаемой чат-ботами. Если в поддержку поступает большое количество обращений, чат-боты избавляют компанию от необходимости содержать огромный штат операторов, работающих круглосуточно, или снижают нагрузку на них.

# **2.2 СОЗДАНИЕ ЧАТ-БОТА**

Для создания чат-бота в Robochat необходимо:

1.Подключить бота к проекту

2.Создать сценария

3.Добавить шаги в сценарий

4.Публицировать сценарий

5.Проверить работу бота

Для подключения бота к проекту и дальнейших действий надо:

1.Открыть страницу с проектом и выбрать его, чтобы подключить бот

2.Выбрать пункт «Подключение ботов...» — после этого откроется окно подключения нужной платформы.

3.Открыть сценарий, создать его, нажав на кнопку «Новый сценарий».

4.Когда сценарий будет создан, нажать на него, чтобы перейти в визуальный редактор для изменения его содержимого.

5.В сценарии откроется пустое полотно визуального редактора Robochat:

6.Первым делом мы добавляем шаг ключевое слово «/start», после этого добавляем в шаге «Сообщение контент» — приветствие и клавиатуру с кнопками для навигации.

7.Вместо «first name» бот подставит в ответе имя написавшего ему пользователя. Переменные могут использоваться в сообщениях бота и названиях кнопок. Которым будет запускаться наш бот. Затем добавить у кнопок переходы на следующие шаги, которые будут запущены после нажатия по клавиатуре.

8.Потом обдумали и создали вопросы по теме «Компьютерная химия» c ответами и кратким пояснением

9.Чтобы проведенные в сценарии изменения вступили в силу, необходимо опубликовать сценарий, нажав на кнопку «Опубликовать» в правом верхнем углу.

10.После публикации сценария остается написать боту, чтобы проверить настройки в работе, сценарий работы выполняется ботом в точности с нашими настройками.

После прохождения чат-бота вы получаете маленький приз - набор стикеров.

Для создания чат-бота мы использовали сайт https://robochat.io/

# **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Компьютерная химия имеет широкий спектр применений, включая разработку новых лекарств, предсказание свойств материалов и оптимизацию химических реакций. Методы компьютерной химии позволяют исследователям получать информацию о химических системах, которая была бы трудно или невозможно получить экспериментально. Использование современных вычислительных методов позволяет значительно ускорить и оптимизировать процессы в химии. Эти методы помогают исследователям проводить более точные расчеты, сокращают время на разработку новых материалов и препаратов, а также снижают издержки на эксперименты в лабораториях. Однако, несмотря на все преимущества, компьютерная химия также имеет свои ограничения, и результаты моделирования всегда требуют экспериментальной проверки. В целом, компьютерная химия является мощным инструментом для изучения и понимания химических систем, и ее роль в науке и промышленности продолжает расти. Компьютерная химия становится все более востребованной и перспективной областью, способствующей развитию науки и технологий.

В ходе работы над индивидуальным проектом были достигнуты цели, которые заключались в изучение и анализировании применение компьютерной химии в различных областях, а также в моделирование и изучение химических процессов с помощью него. А также разобрали и решили поставленные задачи , а именно ознакомиться с методами и инструментами компьютерной химии. Разобраться в её преимуществах и ограничениях.

Для расширения предстваления по компьютеной химии был создан чат-бот. В нëм Вы сможете пройти викторину по данной тематике, познакомится и узнать о компьютерной химии поподробнее. В ходе викторины надо отвечать на вопросы, после ответа вам будет доступно краткое пояснение и дополнительная информация, также имеется система баллов. В конце, в качестве подарка и вознаграждения, будет доступен набор стикеров.

# **СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Основы компьютерной химии: методические указания / Т.В. Пешкова, Е.В.Сальникова, С.А. Пешков, Оренбургский гос. ун-т. – Оренбург: ООО ИПК
«Университет», 2018. – 36 с.

2. Научные Статьи.Ру – URL: <https://nauchniestati.ru/spravka/kompyuternaya-himiya/>

3. Трофимов М. И., Смоленский Е. А. Применение индексов электроотрицательности органических молекул в задачах химической информатики // Известия Академии наук. Серия химическая. — М., 2005. — № 9. — С. 2166—2176.

4. [Деза М., Сикирич М. Д. Геометрия химических графов: полициклы и биполициклы. ИКИ, 2012. 384 с.](https://ru.ruwiki.ru/wiki/%D0%9A%D0%BE%D0%BC%D0%BF%D1%8C%D1%8E%D1%82%D0%B5%D1%80%D0%BD%D0%B0%D1%8F_%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F#HeGWaHR0cCUzQSUyRiUyRnd3dy5yY2QucnUlMkZkZXRhaWxzJTJGMTQzMg==)