

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова»

Институт фундаментальной и прикладной химии

УТВЕРЖДАЮ
Декан факультета
биологии и экологии



О.А. Маракаев

«19» мая 2023 г.

Рабочая программа дисциплины

«Основы квантово-химического моделирования и оценки реакционной способности органических соединений»

программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре по научной специальности 1.4.3 Органическая химия

Форма обучения очная

Программа одобрена на заседании института фундаментальной и прикладной химии протокол № 7 от «17» апреля 2023 года

Ярославль

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Основы квантово-химического моделирования и оценки реакционной способности органических соединений» в соответствии с общими целями основной профессиональной образовательной программы послевузовского профессионального образования (аспирантура) (далее - образовательная программа послевузовского профессионального образования) являются:

- знание основных постулатах и математическом аппарате квантовой механики;
- представление о приближенных методах решения квантово-механических задач;
- представления об основных положениях квантовой химии;
- знание о неэмпирических и полуэмпирических методах изучения электронного строения атомов и молекул, применение получаемых данных для решения научных и прикладных задач органической химии;
- знание и применение теории реакционной способности органических соединений для решения научных и прикладных задач.

2. Место дисциплины в структуре программы аспирантуры

Данная дисциплина является дисциплиной по выбору.

3. Планируемые результаты освоения дисциплины:

В результате освоения дисциплины аспирант должен:

Знать:

- методы решения квантово-химических задач;
- неэмпирические и полуэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул..

Уметь:

- оценивать и анализировать электронное строение атомов и молекул;
- осуществлять неэмпирические и полуэмпирические расчеты электронного строения атомов и молекул, интерпретировать полученные результаты;
- оценивать реакционную способность карбо- и гетероароматических структур.

Владеть:

- неэмпирическими и полуэмпирическими методами расчетов;
- методами оценки реакционной способности.

4. Объем, структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 акад. часов.

Дисциплина изучается в течение 2-го семестра.

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий и их трудоемкость (в академических часах)	Формы текущего контроля успеваемости Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
-------	--	---------	--	---

			лекции	практические	лабораторные	консультации	самостоятельная работа	
1.	Тема 1. Основы современной теории химического строения.	2	1			1	16	Контрольная работа
2.	Тема 2. Методы квантовой химии.	2	1				17	Задание в рамках самостоятельной работы
3	Тема 3. Межмолекулярное взаимодействие и его описание в квантовой химии.	2	1				17	Задание в рамках самостоятельной работы
4	Тема 4. Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов.	2	1			1	16	Задание в рамках самостоятельной работы
5	Тема 5. Анализ геометрического и электронного строения многоатомных молекул на основе метода МО	2	1				17	Задание в рамках самостоятельной работы
6	Тема 6. Теория реакционной способности органических соединений.	2	1				17	Задание в рамках самостоятельной работы
								Зачет
	Всего		6			2	100	

Содержание разделов дисциплины:

Тема 1. Основы современной теории химического строения. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Поверхность потенциальной энергии. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО).

Тема 2. Полуэмпирические методы квантовой химии. Методы, использующие нулевое дифференциальное перекрытие. Расширенный метод Хюккеля. Метод Хюккеля для электронных систем. Возможности и ограничения применения полуэмпирических методов квантовой химии. Неэмпирические методы. Методы с использованием функционалов матрицы плотности.

Тема 3. Межмолекулярное взаимодействие и его описание в квантовой химии. Ориентационная и индукционная составляющие. Дисперсионное взаимодействие. Ван-дер-Ваальсовы комплексы. Водородная связь.

Тема 4. Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов. Наиболее распространенные программные комплексы (MOPAC, GAUSSIAN и др.).

Тема 5. Анализ геометрического и электронного строения многоатомных молекул на основе метода МО. Органические соединения. Приближения, используемые при расчетах и при интерпретации электронного строения органических соединений. Эффекты среды. Моделирование интермедиатов и переходных структур.

Тема 6. Теория реакционной способности органических соединений. Индексы реакционной способности: индексы свободной валентности, заряды на атомах, индексы Фукуи, энергии катионной, анионной и радикальной локализации. Поиск структуры переходных состояний.

5. Образовательные технологии, в том числе технологии электронного обучения и дистанционные образовательные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

В процессе обучения используются следующие образовательные технологии:

Вводная лекция – дает первое целостное представление о дисциплине и ориентирует студента в системе изучения данной дисциплины. Дается краткий обзор курса, история развития науки и практики, достижения в этой сфере, имена известных ученых, излагаются перспективные направления исследований. На этой лекции высказываются методические и организационные особенности работы в рамках данной дисциплины, а также дается анализ рекомендуемой литературы.

Академическая лекция с элементами лекции-беседы – последовательное изложение материала, осуществляемое преимущественно в виде монолога преподавателя. Элементы лекции-беседы обеспечивают контакт преподавателя с аудиторией, что позволяет привлекать внимание аспирантов к наиболее важным темам дисциплины, активно вовлекать их в учебный процесс, контролировать темп изложения учебного материала в зависимости от уровня его восприятия.

Проблемная лекция – изложение материала, предполагающее постановку проблемных и дискуссионных вопросов, освещение различных научных подходов, связанные с различными моделями интерпретации изучаемого материала. Проблемная лекция начинается с вопросов, с постановки проблемы, которую в ходе изложения материала необходимо решить. В лекции сочетаются проблемные и информационные начала. При этом процесс познания аспирантом в сотрудничестве и диалоге с преподавателем приближается к поисковой, исследовательской деятельности.

Консультации – вид учебных занятий, являющийся одной из форм контроля самостоятельной работы аспирантов. На консультациях по просьбе аспирантов рассматриваются наиболее сложные разделы дисциплины, преподаватель отвечает на вопросы аспирантов, которые возникают у них в процессе самостоятельной работы.

В процессе обучения используются следующие технологии электронного обучения и дистанционные образовательные технологии:

Электронный учебный курс «Основы квантово-химического моделирования и оценки реакционной способности органических соединений» в LMS Электронный университет Moodle ЯрГУ, в котором:

- представлены задания для самостоятельной работы аспирантов по темам дисциплины;

- представлен список литературы, рекомендуемой для освоения дисциплины;
- представлена информация о форме и времени проведения консультаций по дисциплине в случае их проведения в дистанционном формате в режиме онлайн.

6. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (при необходимости), рекомендуемых для освоения дисциплины

а) основная литература

Майер И. Избранные главы квантовой химии. - БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006

http://lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=353478&cat_cd=YARSU

Гельман Г. Квантовая химия. / Г. Гельман - 2-е изд., доп. - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011. - 533 с.

http://lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=1133928&cat_cd=YARSU

б) дополнительная литература

1. О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин. Органическая химия. В 4 ч. М.: БИНОМ.

Лаборатория знаний. 2009. Ч.1, 567 с.;

http://lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=642957&cat_cd=YARSU

2. Орлов В.Ю., Котов А.Д., Русаков А.И. Функционализация карбо- N,О-содержащих гетероароматических систем. - Мир, 2010

http://lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=931882&cat_cd=YARSU

в) ресурсы сети «Интернет» (при необходимости)

1. Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ

(http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php).

2. Химический факультет МГУ (<http://www.chem.msu.ru/>).

7. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине включает в свой состав следующие помещения:

- учебные аудитории для проведения лекций;
- учебные аудитории для проведения групповых и индивидуальных консультаций;
- учебные аудитории для проведения промежуточной аттестации;
- помещения для самостоятельной работы.

Помещения для самостоятельной работы оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ЯрГУ.

Автор:

Профессор института
фундаментальной и прикладной химии, д.х.н.
(должность, ученая степень)


(подпись) _____ В.Ю. Орлов
(Фамилия И.О.)

Приложение №1 к рабочей программе дисциплины
«Основы квантово-химического моделирования и оценки реакционной
способности органических соединений»

Оценочные материалы
для проведения текущей и/или промежуточной аттестации
аспирантов по дисциплине

1. Контрольные задания и (или) иные материалы,
используемые в процессе текущего контроля успеваемости

Задания для самостоятельной работы.

Контрольная работа № 1

Основные положения современной теории химического строения.

Задание № 1

Подобрать подход и получить данные квантово-химического моделирования заданной структуры.

Задание № 2

С использованием различных методов оценить степень взаимодействия двух органических молекул, содержащих разнообразные функциональные группы.

Задание № 3

Провести расчет заданной структуры различными методами с использованием различных программных комплексов.

Задание № 4

Проанализировать результаты выполненных в **Задании № 3** расчетов и сделать заключение об особенностях геометрического и электронного строения.

Задание № 5

Поиск структуры переходного состояния для заданного процесса.

2. Список вопросов и (или) заданий для проведения промежуточной аттестации

Список вопросов к зачету:

1. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение.
2. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул.
3. Поверхность потенциальной энергии.
4. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО).
5. Учет симметрии ядерной конфигурации при рассмотрении электронной задачи.
6. Полуэмпирические методы квантовой химии.
7. Неэмпирические методы квантовой химии.
8. Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов.
9. Межмолекулярное взаимодействие и его описание в квантовой химии.
10. Особенности квантово-химического моделирования строения гетероциклических ароматических соединений.
11. Индексы реакционной способности.
12. Моделирование промежуточных частиц.
13. Учет влияния среды в квантово-химическом моделировании.
14. Моделирование ППЭ для реакций карбо- и гетероароматических систем.

2.1 Описание процедуры выставления оценки

По итогам зачета выставляется одна из оценок: «зачтено», «незачтено».

Правила выставления оценки на зачете:

Устный ответ студента на зачете оценивается по 2-х балльной системе.

Отметка «зачтено» ставится, если:

- знания отличаются глубиной и содержательностью, дается полный исчерпывающий ответ, как на основные вопросы к зачету, так и на дополнительные;
- аспирант свободно владеет научной терминологией;
- ответ аспиранта структурирован, содержит анализ существующих теорий, научных школ, направлений и их авторов;
- ответ аспиранта логично и доказательно раскрывает проблему, предложенную для решения;
- ответ аспиранта характеризуется глубиной, полнотой и не содержит фактических ошибок;
- ответ аспиранта иллюстрируется примерами, в том числе из собственной научно-исследовательской деятельности;
- аспирант демонстрирует умение аргументировано вести диалог и научную дискуссию;
- аспирант демонстрирует навыки поиска и обработки научной информации и экспериментальных данных.

Отметка «незачтено» ставится, если:

- ответ аспиранта обнаружил незнание или непонимание сущностной части дисциплины;
- содержание вопросов не раскрыто, допускаются существенные фактические ошибки, которые аспирант не может исправить самостоятельно;
- на большую часть дополнительных вопросов по содержанию зачета аспирант затрудняется дать ответ или не дает верных ответов;
- аспирант не демонстрирует навыки поиска и обработки научной информации и экспериментальных данных.