



**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИРКУТСКИЙ ИНСТИТУТ ХИМИИ им. А.Е. ФАВОРСКОГО
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК**



УТВЕРЖДАЮ
Директор, д.х.н.

А.В. Иванов

« 27 » мая 2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

**Основы квантово-химического моделирования строения молекул
и реакционной способности веществ**

основная образовательная программа –
программа подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре
по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки,
профиль Органическая химия

Квалификация: Исследователь.
Преподаватель-исследователь.

Год набора:

Иркутск 2021

Рабочая программа составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации) (утвержден Приказом Министерства образования и науки РФ от 30.07.2014 № 869)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА РАССМОТРЕНА И ОДОБРЕНА на заседании Ученого совета ИрИХ СО РАН протокол № 5 от «17» мая 2021 г.

Начальник отдела аспирантуры к.х.н.

 Н.Н. Трофимова

1. Цели и задачи учебной дисциплины

Рассматриваемая дисциплина относится к элективным дисциплинам при подготовке аспирантов, обучающихся по профилю Органическая химия.

Целью изучения дисциплины является приобретение фундаментальных знаний и практических навыков, необходимых для профессиональной научно-исследовательской и образовательной деятельности в области квантовой химии и в смежных областях науки; формирование обобщающей теоретической базы для изучения строения и реакционной способности веществ методами квантовой химии.

Задачи:

- формирование у обучающихся современных представлений о квантовой химии, ее роли и значимости в сопоставлении с другими химическими науками;
- освоение теоретических основ квантовой химии;
- формирование глубокого понимания общих закономерностей зависимости свойств соединений от их строения;
- освоение навыков применения методов моделирования электронного строения атомов и молекул для решения научных и прикладных задач химии;
- формирование представлений о квантово-химической теории реакционной способности соединений и получение навыков ее использования для решения научных и прикладных задач;
- освоение методов планирования эксперимента и обработки собственных исследований;
- обучение умению систематизировать и обобщать результаты собственных исследований в сопоставлении с известными литературными данными;
- обучение умению оформлять результаты собственных исследований в виде публикаций, отчетов, докладов;
- освоение методики преподавания химии.

2. Место дисциплины в структуре ООП

2.1. Учебная дисциплина Б1.В.ДВ.2.2 «Основы квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности веществ» входит в вариативную часть междисциплинарного профессионального модуля ООП.

2.2. Данная программа строится на преемственности программ в системе высшего образования и предназначена для аспирантов ИрИХ СО РАН, прошедших обучение по программе магистров или специалистов, прослушавших соответствующие курсы и имеющих по ним положительные оценки. Она основывается на положениях, отраженных в учебных программах указанных уровней. Для освоения дисциплины «Основы квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности веществ» требуются знания и умения, приобретенные обучающимися в результате освоения ряда предшествующих дисциплин (разделов дисциплин), таких как:

- Квантовая химия;

- Физическая химия;
- Строение вещества;
- Физико-химические методы анализа;
- Органическая химия;
- Химия высокомолекулярных соединений;
- Неорганическая химия.

2.3. Освоение дисциплины «Основы квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности веществ» необходимо при подготовке к государственной итоговой аттестации.

3. Требования к результатам освоения дисциплины

Процесс изучения дисциплины «Основы квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности веществ» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ООП по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки, профиль Органическая химия:

Профессиональные компетенции

- владение базовыми представлениями о теоретических основах органической химии, механизмах органических реакций, стереохимии, химии элементоорганических и высокомолекулярных соединений (ПК-3);
- умение применять физико-химические методы исследования структуры вещества, знание основ квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности вещества (ПК-4).

По окончании изучения дисциплины аспиранты должны:

Знать:

- типовые методы и современные методологии решения квантово-химических задач;
- методы изучения электронного строения атомов и молекул;
- основы квантово-химической теории реакционной способности соединений;
- механизмы базовых химических реакций в органической и элементоорганической химии, подходы и методы изучения механизмов;
- влияние строения на реакционную способность и физико-химические свойства органических соединений;
- физико-химические методы исследования строения органических соединений и реакций органической химии;
- современную периодическую литературу (журналы) и электронные базы данных по органической химии, методы поиска информации о свойствах и синтезе органических веществ;
- роль и место квантовой химии в системе фундаментальных химических наук.

Уметь:

- оценивать и анализировать электронное строение атомов и молекул;
- осуществлять расчеты электронного строения атомов и молекул, интерпретировать полученные результаты;
- оценивать реакционную способность органических и элементоорганических соединений с помощью методов квантовой химии;
- осуществлять поиск литературных данных по теме исследования с использованием современных баз данных и поисковых систем.

Иметь опыт:

- планирования и проведения эксперимента по теме научного исследования;
- применения квантово-химических расчетов электронного строения атомов и молекул;
- моделирования свойств веществ и параметров органических реакций с использованием квантово-химических методов;
- написания научных отчетов, статей, проектов.

4. Структура и содержание учебной дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 1 зачетная единица (36 часов).

4.1. Структура дисциплины

| № | Наименование дисциплины | Объем учебной работы, ч | | | | | | Самост. работа | Вид итогового контроля |
|---|--|-------------------------|-----------------|---------------|------|--------|-----|----------------|------------------------|
| | | Всего | Всего аудиторн. | Из аудиторных | | | | | |
| | | | | Лекц. | Лаб. | Практ. | КСР | | |
| 1 | Основы квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности веществ | 36 | 18 | 9 | - | 9 | - | 18 | Зачет |

4.2. Содержание дисциплины

4.2.1. Разделы дисциплины и виды занятий

| № | Наименование разделов и тем | Виды учебной работы и трудоемкость, ч | | | | | | Формы текущего контроля успеваемости |
|---------------------|--|---------------------------------------|----------|----------|----------|-----------|----------|---------------------------------------|
| | | Всего | Лекц. | Лаб | Практ | СР | КСР | |
| 1 | Основы современной теории химического строения. | 6 | 2 | - | 1 | 3 | - | Устный групповой опрос |
| 2 | Методы квантовой химии. | 6 | 2 | - | 1 | 3 | - | Устный групповой опрос |
| 3 | Межмолекулярное взаимодействие и его описание в квантовой химии. | 6 | 1 | - | 2 | 3 | - | Устный групповой опрос |
| 4 | Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов. | 6 | 1 | - | 2 | 3 | - | Устный групповой опрос, решение задач |
| 5 | Анализ геометрического и электронного строения многоатомных молекул на основе метода МО. | 6 | 1 | - | 2 | 3 | - | Устный групповой опрос |
| 6 | Теория реакционной способности органических соединений. | 6 | 2 | - | 1 | 3 | - | Устный групповой опрос |
| Всего часов: | | 36 | 9 | - | 9 | 18 | - | |

4.2.2. Содержание разделов дисциплины

| № | Наименование раздела дисциплины | Содержание раздела (темы) | Формы проведения занятий |
|---|--|---|--|
| 1 | Основы современной теории химического строения. | Уравнение Шредингера и способы его решения. 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). | Лекции, семинары, самостоятельная работа |
| 2 | Методы квантовой химии. | Методы, использующие нулевое дифференциальное перекрытие. Методы <i>ab initio</i> . Методы на основе теории функционала плотности. Влияние базисного набора. Возможности и ограничения применения методов квантовой химии. | Лекции, семинары, самостоятельная работа |
| 3 | Межмолекулярное взаимодействие и его описание в квантовой химии. | Водородная связь. Вандерваальсовы комплексы. Сольватация и энергия сольватации. Специфические и неспецифические взаимодействия. Модели Онзагера и РСМ. | Лекции, семинары, самостоятельная работа |
| 4 | Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов. | Наиболее распространенные программные комплексы. | Лекции, семинары, самостоятельная работа |
| 5 | Анализ геометрического и электронного строения многоатомных молекул на основе метода МО. | Оптимизация геометрии. Поправки на энергию нулевых колебаний. Расчет термодинамических параметров молекул. Расчет частот колебаний многоатомных молекул. Эффекты среды. ППЭ и стационарные точки на ней. Сканирование ППЭ. | Лекции, семинары, самостоятельная работа |
| 6 | Теория реакционной способности органических соединений. | Прямая и обратная кинетические задачи. Индексы реакционной способности: индексы свободной валентности, заряды на атомах, индексы Фукуи, энергии катионной, анионной и радикальной локализации. Поиск структуры переходных состояний. | Лекции, семинары, самостоятельная работа |

5. Образовательные технологии

1. Активные образовательные технологии: лекции, семинары и практические работы.
2. Сопровождение лекций визуальными материалами в виде слайдов, подготовленных с использованием современных компьютерных технологий, проецируемых на экран с помощью видеопроектора.
3. Проведение практических работ в лабораториях, участие обучающихся в научной работе и выполнении исследовательских проектов.
4. Использование специального программного обеспечения и Интернет-ресурсов для обучения в ходе практических и самостоятельных работ.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов

Виды самостоятельной работы:

в домашних условиях, в читальном зале библиотеки, на компьютерах с доступом к базам данных и ресурсам Интернет, в лабораториях с доступом к лабораторному оборудованию и приборам.

Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, учебное и научное программное обеспечение, ресурсы Интернет.

7. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

Цель контроля - получение информации о результатах обучения и степени их соответствия результатам обучения.

7.1. Текущий контроль

Текущий контроль успеваемости, т.е. проверка усвоения учебного материала, регулярно осуществляемая на протяжении семестра. Текущий контроль знаний учащихся организован как устный групповой опрос (УГО).

Текущая самостоятельная работа аспиранта направлена на углубление и закрепление знаний, и развитие практических умений аспиранта.

7.2. Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация осуществляется в конце семестра и завершает изучение дисциплины ««Основы квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности веществ». Форма аттестации – зачет.

Контрольные вопросы к зачету:

1. Основы современной теории химического строения.

Уравнение Шредингера и способы его решения. 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).

2. Методы квантовой химии.

Методы, использующие нулевое дифференциальное перекрывание. Методы *ab initio*. Методы на основе теории функционала плотности. Влияние базисного набора. Возможности и ограничения применения методов квантовой химии.

3. Межмолекулярное взаимодействие и его описание в квантовой химии.

Водородная связь. Вандерваальсовы комплексы. Сольватация и энергия сольватации. Специфические и неспецифические взаимодействия. Модели Онзагера и РСМ.

4. Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов.

Наиболее распространенные программные комплексы (GAUSSIAN и др.).

5. Анализ геометрического и электронного строения многоатомных молекул.

Оптимизация геометрии. Поправки на энергию нулевых колебаний. Расчет термодинамических параметров молекул. Расчет частот колебаний многоатомных молекул. Эффекты среды. ППЭ и стационарные точки на ней. Сканирование ППЭ.

6. Теория реакционной способности органических соединений.

Прямая и обратная кинетические задачи. Индексы реакционной способности: индексы свободной валентности, заряды на атомах, индексы Фукуи, энергии катионной, анионной и радикальной локализации. Поиск структуры переходных состояний.

Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования в рамках промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

| Показатели | Критерии оценивания | Средства оценивания |
|---|--|---------------------|
| Знать: типовые методы и современные методологии решения квантово-химических задач (ПК 3,4); | <i>низкий уровень:</i> имеет слабый уровень теоретической и профессиональной подготовки, степень владения компетенциями 35-40% | вопросы 1-6; |
| методы изучения электронного строения атомов и молекул (ПК 4); | <i>средний уровень:</i> | вопросы 1, 5; |
| основы квантово-химической теории реакционной способности соединений (ПК 3); | имеет хороший уровень теоретической и профессиональной подготовки, степень владения компетенциями 41-70% | вопросы 6; |
| механизмы базовых химических реакций в органической и элементоорганической химии, подходы и методы изучения механизмов (ПК 3); | <i>высокий уровень:</i> имеет отличный уровень теоретической и профессиональной подготовки, степень владения компетенциями больше 71% | вопросы 6; |
| влияние строения на реакционную способность и физико-химические свойства органических соединений (ПК 3); | | вопросы 5,6; |
| физико-химические методы исследования строения органических соединений и реакций органической химии (ПК 4); | | вопросы 1-6; |
| современную периодическую литературу (журналы) и электронные базы данных по органической химии, методы поиска информации о свойствах и синтезе органических веществ (ПК 3,4); | | вопросы 1-6; |
| роль и место квантовой химии в системе фундаментальных химических наук (ПК 3,4). | | вопросы 1-6; |
| Уметь: оценивать и анализировать электронное строение атомов и молекул (ПК 3*); | <i>низкий уровень:</i> имеет слабый уровень теоретической и профессиональной подготовки, степень владения компетенциями 35-40% | вопросы 4,5; |
| осуществлять расчеты электронного строения атомов и молекул, интерпретировать полученные результаты (ПК 3); | <i>средний уровень:</i> имеет хороший уровень теоретической и профессиональной подготовки, степень владения компетенциями 41-70% | вопрос 4; |
| оценивать реакционную способность органических и элементоорганических соединений с помощью методов квантовой химии (ПК 3); | <i>высокий уровень:</i> имеет отличный уровень теоретической и профессиональной подготовки, степень владения компетенциями больше 71% | вопросы 2,4-6; |
| осуществлять поиск литературных данных по теме исследования с использованием современных баз данных и поисковых систем (ПК 3,4); | | вопросы 1-6; |
| Иметь опыт: планирования и проведения эксперимента по теме научного исследования (ПК 3); | <i>низкий уровень:</i> имеет слабый уровень теоретической и профессио- | вопросы 4,5; |

| | | |
|--|--|--------------|
| применения квантово-химических расчетов электронного строения атомов и молекул (ПК 3); | нальной подготовки, степень владения компетенциями 35-40% <i>средний уровень:</i> | вопросы 4,5; |
| моделирования свойств веществ и параметров органических реакций с использованием квантово-химических методов (ПК 3,4); | имеет хороший уровень теоретической и профессиональной подготовки, степень владения компетенциями 41-70% | вопросы 4-6; |
| написания научных отчетов и статей (ПК 3,4). | <i>высокий уровень:</i> имеет отличный уровень теоретической и профессиональной подготовки, степень владения компетенциями больше 71% | вопросы 1-6; |

* Жирным шрифтом выделены показатели, соответствующие **высокому уровню** сформированности компетенции

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение учебной дисциплины

Основная литература

1. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 1 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 567 с.
2. Трофимов, А. Б. Введение в квантовую химию: учеб. пособие. – Иркутск: Изд-во ИГУ. 2013. – 192 с.

Дополнительная литература

1. Foresman, J. V. Exploring Chemistry With Electronic Structure Methods / J. V. Foresman, A. E. Frisch. – 2nd ed. – Pittsburgh: Gaussian Inc, 1996. – 304 с.
2. Афанасьев, Б. Н. Физическая химия / Б. Н. Афанасьев, Ю. П. Акулова. – М.: Лань, 2012. – 464 с.
3. Горшков, В. И. Основы физической химии / В. И. Горшков, И. А. Кузнецов. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 407 с.
4. Илиел, Э. Основы органической стереохимии / Э. Илиел. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 703 с.
5. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 2 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 623 с.
6. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 3 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 544 с.
7. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 4 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 726 с.
8. Сильверстейн, Р. Спектрометрическая идентификация органических соединений / Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 557 с.
9. Эльшенбройх, К. Металлоорганическая химия / К. Эльшенбройх. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 750 с.

Электронные ресурсы

1. Байков, Ю.А. Квантовая механика [Электронный ресурс]: учебное пособие / Ю.А. Байков, В.М. Кузнецов. — Электрон. дан. — Москва: Издательство "Лаборатория знаний", 2015. — 294 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/70719>. — Загл. с экрана.
2. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия [Электронный ресурс]: / В.И. Барановский. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург: Лань, 2017. — 428 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/92941>. — Загл. с экрана.

3. Белашенко, Д.К. Компьютерные методы в физике и физической химии. Лабораторный практикум [Электронный ресурс]: учебное пособие / Д.К. Белашенко. — Электрон. дан. — Москва: МИСИС, 2012. — 109 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/47442>. — Загл. с экрана.
4. Бутырская, Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView [Электронный ресурс]: монография / Е.В. Бутырская. — Электрон. дан. — Москва: СОЛОН-Пресс, 2011. — 224 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/13803>. — Загл. с экрана.
5. Смирнов, В.П. Групповые методы в теории атомов, молекул и кристаллов [Электронный ресурс]: учебное пособие / В.П. Смирнов. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург: НИУ ИТМО, 2013. — 106 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/43465>. — Загл. с экрана.
6. Соломоник, В.Г. Квантово-химические расчеты строения и колебательно-вращательных спектров двухатомных молекул [Электронный ресурс]: учебное пособие / В.Г. Соломоник. — Электрон. дан. — Иваново: ИГХТУ, 2008. — 80 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/4501>. — Загл. с экрана.
7. Хельтье, Х.-. Молекулярное моделирование: теория и практика [Электронный ресурс]: учебное пособие / Х.-. Хельтье, В. Зиппль, Д. Роньян, Г. Фолькерс. — Электрон. дан. — Москва: Издательство "Лаборатория знаний", 2015. — 322 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/66153>. — Загл. с экрана.
8. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс]: учебное пособие / В.Г. Цирельсон. — Электрон. дан. — Москва: Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 522 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94104>. — Загл. с экрана.

Интернет-ресурсы

- [Taylor & Francis](#) (журналы издательства)
- [American Chemical Society](#)
- [Thieme Chemistry](#)
- [Wiley Online Library](#)
- [Royal Society Chemistry](#)
- [Springer](#)
- [Sci Finder \(Chemical Abstracts Service\)](#)
- [Web of Science](#)
- [Реферативная база данных ГПНТБ СО РАН](#)
- [E-library](#)
- [ЭБС «Издательство «Лань»](#)

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Для освоения программы обучения и для выполнения научно-исследовательских работ по теме диссертации каждому аспиранту предоставлено индивидуальное рабочее место, оборудованное приточно-вытяжной вентиляцией, водопроводом, водоотведением, воздуховодом. При выполнении квалификационных и диссертационных работ аспиранты имеют возможность использовать материально-технические средства лабораторий (оргтехника, реактивы, расходные материалы, лабораторная посуда, измерительное оборудование и др.), а также имеют доступ к дорогостоящему оборудованию ИрИХ и Байкальского центра коллективного пользования СО РАН (цифровой мультядерный Фурье-спектрометр JAMP DPX-400, ЯМР-спектрометр AV-400 фирмы Bruker Bio-Spin, хроматомасс-спектрометр GCMS-QP5050A фирмы SHIMADZU, импульсный ЭПР-спектрометр Bruker ELEXSYS E580, инфракрасный Фурье-спектрометр IFS-25 фирмы Bruker, ИК-КР Фурье спектрометры Varian и Vertex-70 фирмы Varian, UV/VIS-спектрометр Lamda 35 фирмы

Perkin Elmer, спектрофлуориметр LS55, изготовитель Perkin Elmer, порошковый дифрактометр D2 PHASER, монокристаллический дифрактометр D8 VENTURE и др.) Для проведения квантово-химических расчетов имеется вычислительный кластер 39Гц/112Гб/14Тб и необходимое программное обеспечение.

Автор-составитель рабочей программы учебной дисциплины:

 / Петрущенко Н.К. /