



**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
<b>Всего часов:</b>		<b>36</b>	<b>9</b>	<b>-</b>	<b>9</b>	<b>18</b>	<b>-</b>	

#### 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
<b>Знать:</b> 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;
<b>Уметь:</b> 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;
<b>Иметь опыт:</b> 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. /