


МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова

Кафедра органической и биологической химии

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета биологии и экологии



О.А. Маракаев
«20» мая 2021 г.

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

Направление подготовки
04.06.01 «Химические науки»

Направленность (профиль)
«Органическая химия»

Форма обучения
очная

Программа одобрена
на заседании кафедры
от «11» мая 2021 года, протокол № 13

Ярославль

1. 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 относится к разделу дисциплин по выбору (Б1.В.ДВ.2.1).

Дисциплина «Основы квантово-химического моделирования и оценки реакционной способности органических соединений» показывает пути решения одной из основных проблем современной органической химии – установление характера и природы связи «структура-свойства».

Для изучения данной дисциплины необходимы «входные» знания, умения, полученные в процессе обучения по программам специалитета или бакалавриата – магистратуры, а также при изучении дисциплины «Современная органическая химия») в аспирантуре и готовность обучающегося, к восприятию знаний и навыков, необходимых при освоении данной дисциплины и приобретенных в результате освоения предшествующих дисциплин. Освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее для выполнения и защиты диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине – знания, умения, навыки и (или) опыт деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций и обеспечивающие достижение планируемых результатов освоения программы аспирантуры, и критерии их оценивания

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

- **Профессиональные компетенции:** способностью применять современные представления о моделировании химических процессов и систем для решения фундаментальных и прикладных задач органической химии (ПК-2).

Код компетенции	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения		
		Пороговый уровень	Продвинутый уровень	Высокий уровень
ПК - 2	<p>знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - методы решения квантово-химических задач; - неэмпирические и полуэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул. 	<ul style="list-style-type: none"> - полуэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул. 	<ul style="list-style-type: none"> - методы решения квантово-химических задач; - неэмпирические и полуэмпирические методы 	<ul style="list-style-type: none"> - методы решения квантово-химических задач; - неэмпирические и полуэмпирические методы

			изучения электронного строения атомов и молекул.	изучения электронного строения атомов и молекул - подходы к оценке реакционной способности.
	<p>уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - 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. 	- осуществлять полуэмпирические расчеты электронного строения атомов и молекул	- 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.	- 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, прогнозировать ее значение для новых структур.
	<p>владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - неэмпирическими и полуэмпирическими методами расчетов; - методами оценки реакционной способности. 	- полуэмпирическими методами расчетов	- неэмпирическими и полуэмпирическими методами расчетов; - методами оценки реакционной способности.	- неэмпирическими и полуэмпирическими методами расчетов, верификацией полученных результатов; - методами оценки реакционной способности.

4. Объем, структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных 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
			лекции	практические	лабораторные	консультации	самостоятельная работа	Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
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, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

В процессе обучения используются следующие образовательные технологии:

Академические лекции (или лекция общего курса) – последовательное изложение материала, осуществляемое преимущественно в виде монолога преподавателя. Требования к академической лекции: современный научный уровень и насыщенная информативность, убедительная аргументация, доступная и понятная речь, четкая структура и логика, наличие ярких примеров, научных доказательств, обоснований, фактов. Лекции имеют мультимедийное сопровождение

Самостоятельная работа– изучение студентами теоретического материала, подготовка к лекциям и отработка навыков по решению ситуационных задач.

6. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень лицензионного программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости).

В процессе осуществления образовательного процесса используются:

- мультимедийное сопровождение лекций;
- программы Microsoft Office;
- для поиска учебной литературы библиотеки ЯрГУ – Автоматизированная библиотечная информационная система "БУКИ-NEXT" (АБИС "Буки-Next").

7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимых 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,O-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»

1. Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ

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

2. Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам" (<http://www.edu.ru> (раздел Учебно-методическая библиотека) или по прямой ссылке <http://window.edu.ru/library>).

3. Американское химическое общество (<http://www.acs.org/>).

4. Королевское химическое общество (<http://www.rsc.org/>).

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

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

Мультимедийное оборудование и раздаточный материал (формулы, стандартные показатели и т.д., необходимые для решения ситуационных задач)

Автор:

Профессор кафедры
органической и биологической 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 средства
для проведения текущей и/или промежуточной аттестации аспирантов
по дисциплине

1. Типовые контрольные задания или иные материалы,
необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности,
характеризующих этапы формирования компетенций

1.1 Список вопросов и (или) заданий для проведения промежуточной аттестации

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.

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.

Приложение № 2 к рабочей программе дисциплины
«Основы квантово-химического моделирования и оценки реакционной способности органических соединений»

Методические указания для аспирантов по освоению дисциплины

Приступая к изучению дисциплины, необходимо в первую очередь ознакомиться с содержанием РПД. Лекции имеют целью дать систематизированные основы научных знаний об оценке риска здоровью, кроме этого на лекциях разбираются типовые ситуационные задачи по темам.

1. Текущий контроль успеваемости.

При изучении и проработке теоретического материала необходимо:

- повторить законспектированный на лекционном занятии материал;
- пользуясь лекционным материалом и основной литературой, рекомендованной для освоения дисциплины, выполнить практические задания, которые выдаются преподавателем в конце лекции. Задания подготавливаются самостоятельно, оформляются в письменном (печатном) виде и сдаются преподавателю на проверку в течении недели с момента его получения.

2. Промежуточная аттестация.

Зачетное мероприятие будет складываться из ответа на теоретический вопрос из перечня, приведенного в Приложении №1 пункт 1.1 " Список вопросов к зачету

**Учебно-методическое обеспечение
самостоятельной работы аспирантов по дисциплине**

Для самостоятельной работы аспирант может использовать конспекты лекций, основную и дополнительную учебную литературу, приведенную в пункте 7 данной РПД, а также ресурсы сети "Интернет".

**Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»,
рекомендованных к использованию при освоении дисциплины**

1. Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ (http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php).
2. Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам" (<http://www.edu.ru> (раздел Учебно-методическая библиотека) или по прямой ссылке <http://window.edu.ru/library>).
3. Американское химическое общество (<http://www.acs.org/>).
4. Королевское химическое общество (<http://www.rsc.org/>).
5. Химический факультет МГУ (<http://www.chem.msu.ru/>).