

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
*Химический факультет*

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ РЕАКЦИОННОЙ  
СПОСОБНОСТИ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ**

Кафедра физической и органической химии  
химического факультета

Образовательная программа магистратуры

Направление подготовки  
**04.04.01 Химия**

Профиль подготовки  
**Органическая химия**

Уровень высшего образования: **магистратура**

Форма обучения: **Очная**

**Квалификация**  
магистр

Статус дисциплины: **вариативная по выбору**

Махачкала, 2016 г.





Дисциплина “Квантово-химические расчеты реакционной способности органических молекул” входит в вариативную часть дисциплин по выбору образовательной программы *магистратуры* 04.04.01 Химия.

Дисциплина реализуется на химическом факультете кафедрой физической и органической.

Содержание дисциплины охватывает круг вопросов, связанных с математическим аппаратом и методами квантовой механики для описания электронного строения и расчета химических свойств соединений, начиная с атомов и простейших молекул и кончая высокомолекулярными.

Дисциплина нацелена на формирование следующих профессиональных компетенций выпускника: ПК-2, ПК-3.

Преподавание дисциплины предусматривает проведение следующих видов учебных занятий: *лекции, лабораторные занятия.*

Рабочая программа дисциплины предусматривает проведение следующих видов контроля успеваемости в форме *отчетов по лабораторным работам, контрольных работ и коллоквиумов, устный опрос, письменный опрос, тестирование* и промежуточный контроль в форме дифференцированного зачета.

Объем дисциплины 4 зачетных единиц, в том числе в академических часах по видам учебных занятий:

Семестр	Учебные занятия в том числе Контактная работа обучающихся с преподавателем						СРС, в том числе экзамен	Форма промежуточной аттестации (зачет, дифференцированный зачет, экзамен)
	Все го	из них						
		Лекции	Лабораторные занятия	Практ. занятия	КСР	Консульт		
3	144	10	20	-	-	-	114	диф. зачет

## 1. Цели освоения дисциплины

Целью изучения дисциплины “Квантово-химические расчеты реакционной способности органических молекул” является получение теоретических знаний о современных представлениях квантовой химии, о методах расчета пространственной и электронной структуры органических молекул, а также приобретение умений и навыков работы с комплексами квантово-химических программ.

## 2. Место дисциплины в структуре ООП магистратуры

Дисциплина “Квантово-химические расчеты реакционной способности органических молекул” входит в вариативную часть дисциплин по выбору образовательной программы *магистратуры* 04.04.01 Химия.

Курс “Квантово-химические расчеты реакционной способности органических молекул” предполагает успешное освоение предыдущих курсов “Физическая химия”, “Органическая химия” и “Квантовая химия”.

## 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (перечень планируемых результатов обучения)

Компетенции	Формулировка компетенции из ФГОС ВО	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)
ПК-2	владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии	Имеет четкое, целостное представление об общих закономерностях смежных с химией естественнонаучных дисциплин и способах их использования при решении профессиональных задач в области химии и материаловедения
ПК-3	готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований	В полном объеме владеет навыками многостадийного синтеза, основными методами диагностики веществ (материалов) и методами обработки результатов эксперимента

## 4. Объем, структура и содержание дисциплины.

4.1. Объем дисциплины составляет 4 зачетных единиц, 144 академических часа.

4.2. Структура дисциплины.

№ п/п	Разделы и темы дисциплины	се-мestр	Не-деля семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Само-стоя-тель-ная ра-бота	Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лек.	Практ. зан.	Лаб. занятия			
<b>Модуль 1. Квантово-механическое описание молекулы</b>									
1	Метод Хартри-Фока.	3	2	2		4		30	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
	<i>Итого по модулю 1:</i> 36			2		4		30	коллоквиум
<b>Модуль 2. Методы квантовой химии.</b>									
2	Полуэмпирические	3	5	2		4			Устный опрос,

3	методы квантовой химии.						12	письменный опрос, тестирование Устный опрос, письменный опрос, тестирование коллоквиум
	Неэмпирический метод ab initio	3	6	2		4	12	
	<i>Итого по модулю 2: 36</i>			4		8	24	
<b>Модуль 3. Квантово-химические расчеты физических характеристик</b>								
4	Квантово-химические расчеты физических характеристик	3	7	2		4	30	Устный опрос, письменный опрос, тестирование коллоквиум
	<i>Итого по модулю 3:36</i>			2		4	30	
<b>Модуль 4. Методы квантовой химии для моделирования органических реакций.</b>								
5	Методы квантовой химии для моделирования органических реакций.	3	8	2		4	30	Устный опрос, письменный опрос, тестирование коллоквиум
	<i>Итого по модулю 4:36</i>	36		2		4	30	коллоквиум
	<i>Итого:</i>	144		10		20	114	

#### 4.3. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам).

##### Модуль 1. Квантово-механическое описание молекулы

Тема 1. Метод Хартри-Фока.

##### Модуль 2. Методы квантовой химии.

Тема 2. Полуэмпирические методы квантовой химии.

Тема 3. Неэмпирический метод ab initio

##### Модуль 3. Квантово-химические расчеты физических характеристик

Тема 4. Квантово-химические расчеты физических характеристик

##### Модуль 4. Методы квантовой химии для моделирования органических реакций.

Тема 5. Методы квантовой химии для моделирования органических реакций.

#### 5. Образовательные технологии

В курсе по направлению подготовки магистров широко используются в учебном процессе компьютерные программы, различные методики в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития профессиональных навыков обучающихся. В соответствии с требованиями ФГОС пре-

дусматривается использование при проведении занятий следующих активных методов обучения:

- самостоятельное изучение теоретического материала с последующим разбором на семинарском занятии;
- подготовка к лабораторным работам;
- оформление результатов лабораторной работы;
- подготовка к промежуточному контролю;
- подготовка к экзамену.

## **6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов**

### *6.1. Виды и порядок выполнения самостоятельной работы*

1. Изучение рекомендованной литературы.
2. Подготовка к отчетам по лабораторным работам.
3. Решение задач.
4. Подготовка к коллоквиуму.
5. Поиск в Интернете дополнительного материала.
6. Подготовка к диф. зачету.

№	Вид самостоятельной работы	Вид контроля	Учебно-методич. обеспечение
1.	Изучение рекомендованной литературы.	Устный опрос по разделам дисциплины.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
2.	Подготовка к отчетам по лабораторным работам	Проверка выполнения расчетов, оформления работы в лабораторном журнале и проработки вопросов к текущей теме по рекомендованной литературе.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
3.	Решение задач	Проверка домашних задач.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
4.	Подготовка к коллоквиуму	Промежуточная аттестация в форме контрольной работы.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
5.	Поиск в Интернете дополнительного материала	Прием реферата и выступление с докладом	См. разделы 6.2, 7.3, 8, 9 данного документа.
6.	Подготовка к диф. зачету.	Устный опрос, либо компьютерное тестирование.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.

1. Текущий контроль: подготовка к отчетам по лабораторным работам.
2. Текущий контроль: решение задач.
3. Промежуточная аттестация в форме контрольной работы.

*Текущий контроль* успеваемости осуществляется непрерывно, на протяжении всего курса. Прежде всего, это устный опрос по ходу лабораторных занятий, выполняемый для оперативной активизации внимания студентов и оценки их уровня восприятия. Результаты устного опроса учитываются при

выборе индивидуальных задач для решения. Каждую неделю осуществляется проверка выполнения расчетов, оформления работы в лабораторном журнале.

*Промежуточный контроль* проводится в форме контрольной работы, в которой содержатся теоретические вопросы и задачи.

*Итоговый контроль* проводится либо в виде устного экзамена, либо в форме тестирования.

Оценка “отлично” ставится за уверенное владение материалом курса.

Оценка “хорошо” ставится при полном выполнении требований к прохождению курса и умении ориентироваться в изученном материале.

Оценка “удовлетворительно” ставится при достаточном выполнении требований к прохождению курса и владении конкретными знаниями по программе курса.

Оценка “неудовлетворительно” ставится, если требования к прохождению курса не выполнены и студент не может показать владение материалом.

## **6.2. Примерные темы рефератов**

1. Теория функционала плотности.
2. Современные методы моделирования эффектов растворителя и супрамолекулярного окружения (IPCM, SCPCM, QM/MM, ONIOM, EFP).
3. Применение статистических методов для описания химических процессов (методы Монте-Карло, молекулярная динамика).
4. Современные методы молекулярной механики.
5. Теория возмущений Меллера-Плессета.
6. Приближенные методы в квантовой химии.
7. Методы МО ЛКАО и расширенный метод Хюккеля (PMX).
8. Закономерности в энергии МО линейных полиенов, нейтральных аннуленов, циклоалкенов и циклоалкадиенов.
9. Симметрия молекул линейных полиенов, нейтральных аннуленов, циклоалкенов и циклоалкадиенов.
10. Симметрия молекулярных орбиталей линейных полиенов, нейтральных аннуленов, циклоалкенов и циклоалкадиенов
11. Реакции Дильса-Алдера при различных количествах  $\pi$ -электронов.
12. Реакции внутримолекулярной циклизации линейных полиенов.
13. Истинные пути циклоприсоединения.
14. Истинные пути внутримолекулярной циклизации полиенов.
15. Механизм реакции циклоприсоединения в основном электронном состоянии.

## **7. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.**

7.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы.



Перечень компетенций с указанием этапов их формирования приведен в описании образовательной программы.

Компетенция	Знания, умения, навыки	Процедура освоения
ПК-2	Знать: - основы квантовой механики, - обобщенные закономерности смежных с химией естественно-научных дисциплин и способах их использования при решении профессиональных задач в органической химии.	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
	Уметь: - строить молекулярные молекулы в методах МО ЛКАО и МОХ, - устанавливать симметрию МО исходных веществ, переходного состояния и продуктов реакции.	Письменный опрос, коллоквиум
	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области - владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии	Круглый стол, деловая игра
ПК-3	Знать: - теоретические основы органической, физической и квантовой химии, - современные квантово-химические методы оценки реакционной способности органических соединений	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
	Уметь: - использовать современную теорию сохранения орбитальной симметрии в перициклических реакций при проведении научных исследований; - применять индексы реакционной способности молекул для предсказания и объяснения механизмов реакций.	Письменный опрос, коллоквиум
	Владеть: - в полном объеме теорией стереоспецифичности перициклических реакций.	Круглый стол, деловая игра

7.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций, описание шкал оценивания.

ПК-2 – “Владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии”

Уровень	Показатели (что обучающийся должен продемонстрировать)	Оценочная шкала		
		Удовлетворительно	Хорошо	Отлично
пороговый	Знать: - приближенные методы квантовой химии, - решающее значение электронных параметров атомов и связей в установлении на-	Знать: - общие закономерности смежных с химией естествен-	Знать: - современные направления в области органической и	Знать: - современные направления в области органической и квантовой химии,

	правления реакций.	нонаучных дисциплин	квантовой химии органических соединений.	- общие закономерности смежных с химией естественнонаучных дисциплин
	Уметь: - оценивать возможности квантовой химии в оценке реакционной способности органических соединений.	Уметь: - оценивать возможности получения индексов реакционной способности молекул	Уметь: - оценивать возможности современных методов теоретического анализа	Уметь: - оценивать возможности современных теоретических методов анализа реакционной способности молекул и механизмов реакций..
	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области - владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области - теорией и навыками практической работы
базовый	Знать: -приближенные методы квантовой химии, - решающее значение электронных параметров атомов и связей в установлении направления реакций.	Знать: - общие закономерности смежных с химией естественнонаучных дисциплин	Знать: - современные направления в области органической и квантовой химии органических соединений.	Знать: - современные направления в области органической и квантовой химии, - общие закономерности смежных с химией естественнонаучных дисциплин
	Уметь: - оценивать возможности квантовой химии в оценке реакционной способности органических соединений.	Уметь: - оценивать возможности получения индексов реакционной способности молекул	Уметь: - оценивать возможности современных методов теоретического анализа	Уметь: - оценивать возможности современных теоретических методов анализа реакционной способности молекул и механизмов реакций..
	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области - владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области - теорией и навы-

				ками практической работы
продвинутый	Знать: -приближенные методы квантовой химии, - решающее значение электронных параметров атомов и связей в установлении направления реакций.	Знать: - общие закономерности смежных с химией естественнонаучных дисциплин	Знать: - современные направления в области органической и квантовой химии органических соединений.	Знать: - современные направления в области органической и квантовой химии, - общие закономерности смежных с химией естественнонаучных дисциплин
	Уметь: - оценивать возможности квантовой химии в оценке реакционной способности органических соединений.	Уметь: - оценивать возможности получения индексов реакционной способности молекул	Уметь: - оценивать возможности современных методов теоретического анализа	Уметь: - оценивать возможности современных теоретических методов анализа реакционной способности молекул и механизмов реакций..
	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области - владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области - теорией и навыками практической работы

ПК-3 «Готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований».

Уровень	Показатели (что обучающийся должен продемонстрировать)	Оценочная шкала		
		Удовлетворительно	Хорошо	Отлично
пороговый	Знать: - теоретические основы органической и физической химии, - современные квантово-химические методы оценки реакционной способности органических соединений	знает: - в значительном объеме основные законы органической и физической химии,	знает: - теоретические основы современной органической, физической и квантовой химии в хорошем объеме	знает: - теоретические основы органической и физической химии, - современные квантовохимические методы оценки реакционной способности молекул

	<p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- использовать современную теорию сохранения орбитальной симметрии при проведении научных исследований;</li> <li>-проводить качественную и количественную оценку влияния различных факторов на механизмы химических реакций.</li> </ul>	<p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- использо- вать современную теорию сохранения орбитальной симметрии при проведении научных исследований;</li> </ul>	<p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- использо- вать современные теоретические методы;</li> <li>-проводить качественную оценку влияния различных факторов на механизмы реакций.</li> </ul>	<p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- использовать современные теоретические методы при проведении научных исследований;</li> <li>-проводить качественную и количественную оценку влияния различных факторов на механизмы реакций</li> </ul>
	<p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- в полном объеме владеет навыками многостадийного синтеза, основными методами диагностики веществ и методами обработки результатов расчетов и эксперимента</li> </ul>	<p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- в переделенном объеме навыками многостадийного синтеза желанных соединений</li> </ul>	<p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- навыками многостадийного синтеза с учетом теоретических расчетов</li> </ul>	<p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- в полном объеме владеет навыками многостадийного синтеза с учетом симметрии молекулярных орбиталей.</li> </ul>
базовый	<p>Знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- теоретические основы органической и физической химии,</li> <li>- современные квантово-химические методы оценки реакционной способности органических соединений</li> </ul>	<p>знает:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- в значительном объеме основные законы органической и физической химии,</li> </ul>	<p>знает:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- теоретические основы современной органической, физической и квантовой химии в хорошем объеме</li> </ul>	<p>знает:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- теоретические основы органической и физической химии,</li> <li>- современные квантовохимические методы оценки реакционной способности молекул</li> </ul>
	<p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- использовать современную теорию сохранения орбитальной симметрии при проведении научных исследований;</li> <li>-проводить качественную и количественную оценку влияния различных факторов на механизмы химических реакций.</li> </ul>	<p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- использо- вать современную теорию сохранения орбитальной симметрии при проведении научных исследований;</li> </ul>	<p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- использо- вать современные теоретические методы;</li> <li>-проводить качественную оценку влияния различных факторов на механизмы реакций.</li> </ul>	<p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- использовать современные теоретические методы при проведении научных исследований;</li> <li>-проводить качественную и количественную оценку влияния различных факторов на механизмы реакций</li> </ul>
	<p>Владеть:</p>	<p>Владеть:</p>	<p>Владеть:</p>	<p>Владеть:</p>

	- в полном объеме владеет навыками многостадийного синтеза, основными методами диагностики веществ и методами обработки результатов расчетов и эксперимента	- в переделенном объеме навыками многостадийного синтеза желанных соединений	- навыками многостадийного синтеза с учетом теоретических расчетов	- в полном объеме владеет навыками многостадийного синтеза с учетом симметрии молекулярных орбиталей.
про- двину- тый	Знать: - теоретические основы органической и физической химии, - современные квантово-химические методы оценки реакционной способности органических соединений	знает: - в значительном объеме основные законы органической и физической химии,	знает: - теоретические основы современной органической, физической и квантовой химии в хорошем объеме	знает: - теоретические основы органической и физической химии, - современные квантовохимические методы оценки реакционной способности молекул
	Уметь: - использовать современную теорию сохранения орбитальной симметрии при проведении научных исследований; -проводить качественную и количественную оценку влияния различных факторов на механизмы химических реакций.	Уметь: - использовать современную теорию сохранения орбитальной симметрии при проведении научных исследований;	Уметь: - использовать современные теоретические методы; -проводить качественную оценку влияния различных факторов на механизмы реакций.	Уметь: - использовать современные теоретические методы при проведении научных исследований; -проводить качественную и количественную оценку влияния различных факторов на механизмы реакций
	Владеть: - в полном объеме владеет навыками многостадийного синтеза, основными методами диагностики веществ и методами обработки результатов расчетов и эксперимента	Владеть: -в переделенном объеме навыками многостадийного синтеза желанных соединений	Владеть: - навыками многостадийного синтеза с учетом теоретических расчетов	Владеть: - в полном объеме владеет навыками многостадийного синтеза с учетом симметрии молекулярных орбиталей.

### 7.3. Типовые контрольные задания

#### Формы контроля и критерии оценок

Формы контроля: текущий контроль (систематический учет знаний и активность студентов на занятиях), промежуточный контроль по модулю (рубежная контрольная работа по пройденному блоку тем) и итоговой контроль (экзамен). Текущий контроль осуществляется в виде устного опроса, тести-

рования, проведения коллоквиума, обсуждения реферата, проверки домашнего задания.

Оценка текущего контроля включает 70 баллов:

- допуск к выполнению лабораторных работ (10 баллов);
- выполнение и сдача лабораторных работ (20 баллов);
- тестирование (10 баллов);
- выполнение контрольной работы (с включением задач) – 20 баллов.

Промежуточный контроль (в виде контрольной работы или коллоквиума) оценивается в 30 баллов.

Итоговый контроль (100 баллов) проводится в виде устного собеседования или в виде письменного теста, содержащего вопросы по всем разделам курса “Квантово-химические расчеты реакционной способности органических молекул” изучавшим в процессе семестра. Среднее число баллов по всем модулям, которое дает право получения положительной оценки без итогового контроля знаний – 51 и выше.

#### Типовые тесты

- 1) Метод молекулярных орбиталей Хюккеля позволяет рассчитывать:
  - энергии молекулярных орбиталей
  - электронные плотности
  - геометрию молекул
  - заряды на атомах
  - частоты молекулярных колебаний
- 2) В методе Хюккеля
  - используется приближение самосогласованного поля
  - пренебрегают двухэлектронными кулоновскими интегралами
  - пренебрегают двухэлектронными обменными интегралами
  - фиксируют значения матричных элементов фокиана
- 3) Рассчитанные дипольные моменты равны нулю в молекулах –  $H_2$ 
  - $H_2O$
  - транс- $CH_2Cl=CH_2Cl$
  - цис- $CH_2Cl=CH_2Cl$
  - $O_3$
- 4) Прямой квантово-химический расчет позволяет получать следующие свойства
  - частоты молекулярных колебаний
  - направление вектора дипольного момента
  - величины дипольных моментов
  - энтальпии образования веществ
- 5) Причина того, что энергия, получаемая при расчёте методом UHF обычно ниже, чем методом RHF
  - в расчёте UHF электроны всегда неспарены, что понижает энергию за счёт их меньшего отталкивания
  - систематическая ошибка метода RHF
  - систематическая ошибка метода UHF

- использование двух наборов орбиталей в методе UHF позволяет построить более точные волновые функции, чем в RHF эта закономерность не имеет объяснения
- 6) Выражение для электронного химического потенциала
    - $1/2(I+A)$
    - $A-I$
    - $I-A$
    - $-1/2(I+A)$
  - 7) Основой для введения адиабатического приближения служит
    - малая величина кинетической энергии электронов
    - электронная волновая функция
    - медленно меняющаяся функция ядерных координат
    - большая масса ядер по сравнению с массой электронов
    - малая величина кинетической энергии ядер
    - слабое электростатическое взаимодействие между электронной и ядерной подсистемами
  - 8) В приближении Борна-Оппенгеймера в гамильтониан электронного уравнения входят следующие члены
    - оператор кинетической энергии электронов
    - оператор кинетической энергии ядер
    - оператор потенциальной энергии отталкивания электронов
    - оператор электростатического взаимодействия электронов с ядрами
  - 9) Адиабатическое приближение может плохо выполняться
    - в нежестких молекулах
    - в электронно-возбужденных молекулах
    - в радикалах
    - в случае близкого по энергии расположения электронных состояний
    - при близости по энергии колебательных и электронных переходов
  - 10) Процесс изомеризации в квантово-химическом описании представляет собой
    - переход системы из одного минимума на ППЭ в другой
    - переход системы на соседнюю ППЭ
    - изменение формы ППЭ
    - процесс, не приводящий к движению изображающей точки системы по ППЭ
  - 11) Процесс внутреннего вращения в молекуле этана представляет собой
    - переход системы из одного минимума на ППЭ в другой
    - переход системы на соседнюю ППЭ
    - изменение формы ППЭ
    - процесс, не приводящий к движению изображающей точки системы по ППЭ
  - 12) Конформеры молекулы
    - различаются по положению изображающей точки на ППЭ
    - могут иметь разные химические свойства

- имеют разный состав
  - имеют разное геометрическое строение
- 13) Обозначения неограниченного метода Хартри-Фока
- HXФ
  - HF
  - UHF
  - RHF
  - NO
  - CIS
- 14) Обозначения методов конфигурационного взаимодействия
- CI
  - KB-2
  - CISD
  - МКССП
  - UHF
- 15) К методам функционала плотности относятся
- CISD
  - B3LYP
  - DFT
  - MP2
  - PM3
- 16) Обозначение теории возмущений Меллера-Плессе
- ОХФ
  - B3LYP
  - MP2
  - RHF
  - МКССП
- 17) Среди перечисленных методов полуэмпирическими являются
- PM3
  - RHF
  - AM1
  - ОХФ
  - CISD
- 18) Уравнения Хартри-Фока-Рутана решаются
- приближенно
  - численно
  - аналитически
  - не имеют решений
  - методом самосогласования
- 19) Метод Хартри-Фока-Рутана отличается от метода Хартри-Фока
- более полным учётом электронного отталкивания
  - введением приближения самосогласованного поля
  - введением приближения МО ЛКАО



- учёт интеграла перекрытия
  - инвариантностью относительно ортогональных преобразований МО
- 20) Известные принципиальные недостатки метода Хартри-Фока-Рутана
- симметрия решений может быть ниже симметрии системы
  - проблемы в описании возбужденных электронных состояний
  - плохое описание геометрических параметров молекул
  - неудовлетворительное описание разностей энергий изомеров
  - не учитывается электронная корреляция
- 21) Метод Хартри-Фока-Рутана отличается от метода Хартри
- более полным учётом электронного отталкивания
  - введением приближения самосогласованного поля
  - введением приближения МО ЛКАО
  - учётом интеграла перекрытия
  - инвариантностью относительно ортогональных преобразований МО
- 22) По сравнению с методом RHF расчет молекулы бензола методом CIS в том же базисе
- увеличит энергию системы
  - уменьшит энергию системы
  - не изменит энергию системы
  - приведет к непредсказуемому результату
- 23) Энергия электронной корреляции
- всегда положительна
  - всегда отрицательна
  - характеризует отталкивание ядер
  - характеризует мгновенное кулоновское отталкивание электронов
  - её модуль уменьшается по мере использования все более точной волновой функции
- 24) Существенно более точный учет электронной корреляции может быть достигнут путем
- повышения точности процедуры согласования
  - использования более широких базисных наборов АО
  - использования метода, дающего более точную волновую функцию
  - использования вариационного принципа при расчете энергий
- 25) Последовательность увеличения степени учета электронной корреляции
- UHF
  - FCI (полное KB)
  - CIS
  - RHF
  - CISD
- 26) Оценка электронной заселённости атомов путём деления заселённости перекрытия орбиталей между каждой рассматриваемой парой атомов пополам без учёта природы атомов используется в схеме
- Лёвдина
  - NBO

- Бейдера
  - Малликена
- 27) Использование ортогонального базисного набора используется при анализе заселенности в схеме
- Малликена
  - Лёвдина
  - NBO
  - Бейдера
- 28) Оценка зарядов на атомах путем интегрирования электронной плотности по объему атомного бассейна, ограниченному поверхностью нулевого потока градиента ЭП, используется в схеме
- Малликена
  - Лёвдина
  - NBO
  - Бейдера
- 29) Орбитальными зарядами называются
- заряды по Малликену
  - заряд по Лёвдину
  - заряды по Бейдеру
  - элементы матрицы плотности  $2P_{\alpha\alpha}$
- 30) Рассчитываемые теоретически заряды на атомах зависят от
- выбранной схемы их определения (Лёвдина, Малликена, Бейдера и др.)
  - метода расчета электронной структуры (RHF, MP2, CI и др.)
  - геометрического строения молекулы
  - базисного набора АО

### **Контрольные вопросы к дифференцированному зачету**

1. Основные принципы квантовой механики.
2. Эрмитовы операторы, их собственные векторы и собственные значения.
3. Классификация электронных состояний молекул и классификация молекулярных орбиталей по симметрии;  $\sigma$ - и  $\pi$ - орбитали.
4. Уравнение Шредингера: временное и стационарное.
5. Водородоподобные орбитали, графическое представление их радиальных и угловых частей.
6. Приближения, используемые при решении уравнения Шредингера.
7. Одноэлектронное приближение. Принцип тождественности частиц и принцип Паули. Определитель Слейтера.
8. Метод Хартри-Фока. Фокиан, кулоновские и обменные операторы.
9. Приближение МО ЛКАО.
10. Общие представления о полуэмпирических методах квантовой химии.
11. Выбор адекватного расчетного приближения для расчет физических характеристик.
12. Анализ заселенностей; расчет зарядов на атомах и порядков связей.
13. Моделирование химических реакций.

14. Понятие поверхности потенциальной энергии и координаты реакции.
15. Электронные параметры атомов и связей в методе МОХ.
16. Теоремы об АУ (с иллюстрацией)
17. Поляризуемости атомов и связей. Расчет  $\pi_{1,1}$  в молекуле бутадиена.
18. Индексы реакционной способности молекулы.
19. МО триметиленметана и вычисление индекса свободной валентности молекул.
20. Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения.

## **8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.**

### **а) основная литература**

1. В.И. Барановский. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Академия, 2008, 384 с.  
([http://www.academia-oscow.ru/ftp\\_share/books/fragments/fragment\\_20477.pdf](http://www.academia-oscow.ru/ftp_share/books/fragments/fragment_20477.pdf))
2. А.И. Ермаков. Квантовая механика и квантовая химия. М.: ИД Юрайт, 2010, 555 с. (<http://static.my-shop.ru/product/pdf/56/557285.pdf>)

### **б) Дополнительная**

1. П. Эткинс. Кванты: справочник концепций. М.: Мир, 1977, 496 с.
2. Цюлике П. Квантовая химия. М.: Мир, 1976, 512 с.
3. Заградник Р., Полак Р. Основы квантовой химии. М.: Мир, 1979.
4. В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. М.: Химия, 1986, 246 с.
5. Г.И. Жидомиров, П.В. Счастнев, Н.Д. Чувылкин. Квантовохимические расчеты магнитно-резонансных параметров. Новосибирск: Наука, 1978, 367 с.
6. Г.И. Жидомиров, А.А. Багатурьянц, И.А. Абронин. Прикладная квантовая химия. М.: Химия, 1979, 295
7. В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. Теория строения молекул (Электронные оболочки): М.: Высшая школа, 1997, 407 с.
8. С. Фудзинага. Метод молекулярных орбиталей. М.: Мир, 1983.
9. Р. Мак-Вини, Б. Сатклиф. Квантовая механика молекул. М.: Мир, 1972.
10. С. Уилсон. Электронные корреляции в молекулах. М.: Мир, 1987. – С.304.
11. P. Carsky, M. Urban. Ab Initio Calculations. Methods and applications in chemistry. Lecture notes in Chemistry. Berlin: Verlag, 1980. - V. 16. - P. 235.
12. R.J. Gillespie, P.L.A. Popelier. Chemical bonding and Molecular geometry: From Lewis to Electron densities. Oxford University Press, NY, 2001. – P.268.
13. Т. Кларк. Компьютерная химия. - М.: Мир, 1990. - 383с
14. Полуэмпирические методы расчета электронной структуры. Под ред. Дж. Сигала. – М.: Мир, 1980.- Т.1, С.328; Т.2, С.373.

## **9. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.**

1. <http://quant.distant.ru/>
2. <http://elib.dgu.ru/>
3. <http://www.xumuk.ru/>
4. <http://www.krugosvet.ru/>
6. <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/kolman/index.htm>
7. <http://www.chemport.ru/>
8. <http://himi4ka.ru/>
9. <http://www.chem.msu.su/rus/elibrary/>

## **10. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.**

Методические указания студентам должны раскрывать рекомендуемый режим и характер учебной работы по изучению теоретического курса (или его раздела/части), практических и/или семинарских занятий, лабораторных работ (практикумов), и практическому применению изученного материала, по выполнению заданий для самостоятельной работы, по использованию информационных технологий и т.д. Методические указания должны мотивировать студента к самостоятельной работе и не подменять учебную литературу.

Указывается перечень учебно-методических изданий, рекомендуемых студентам для подготовки к занятиям и выполнения самостоятельной работы, а также методические материалы на бумажных и/или электронных носителях, выпущенные кафедрой своими силами и предоставляемые студентам во время занятий:

- рабочие тетради студентов;
- наглядные пособия;
- гlossарий (словарь терминов по тематике дисциплины);
- тезисы лекций,
- раздаточный материал и др.

Самостоятельная работа студентов, предусмотренная учебным планом в объеме не менее 50-70% общего количества часов, должна соответствовать более глубокому усвоению изучаемого курса, формировать навыки исследовательской работы и ориентировать студентов на умение применять теоретические знания на практике.

Задания для самостоятельной работы составляются по разделам и темам, по которым не предусмотрены аудиторские занятия, либо требуется дополнительно проработать и проанализировать рассматриваемый преподавателем материал в объеме запланированных часов.

Задания по самостоятельной работе могут быть оформлены в виде таблицы с указанием конкретного вида самостоятельной работы:

- конспектирование первоисточников и другой учебной литературы;
- проработка учебного материала (по конспектам лекций учебной и научной литературе) и подготовка докладов на семинарах и практических занятиях, к участию в тематических дискуссиях и деловых играх;

- работа с нормативными документами и законодательной базой;
- поиск и обзор научных публикаций и электронных источников информации, подготовка заключения по обзору;
- выполнение контрольных работ, творческих (проектных) заданий, курсовых работ (проектов);
- решение задач, упражнений;
- написание рефератов (эссе);
- работа с тестами и вопросами для самопроверки;
- выполнение переводов на иностранные языки/с иностранных языков;
- моделирование и/или анализ конкретных проблемных ситуаций ситуации;
- обработка статистических данных, нормативных материалов;
- анализ статистических и фактических материалов, составление выводов на основе проведенного анализа и т.д.

Самостоятельная работа должна носить систематический характер, быть интересной и привлекательной для студента.

Результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем и учитываются при аттестации студента (зачет, экзамен). При этом проводятся: тестирование, экспресс-опрос на семинарских и практических занятиях, заслушивание докладов, проверка письменных работ и т.д.

Разделы и темы для Самостоятельного изучения	Виды и содержание самостоятельной работы
<b>Модуль 1. Квантово-механическое описание молекулы</b>	
Тема 1. Метод Хартри-Фока.	Метод возмущения, вариационный принцип, приближение Борна-Оппенгеймера
<b>Модуль 2. Методы квантовой химии</b>	
Тема 1. Полуэмпирические методы квантовой химии.	Полуэмпирические методы CNDO, INDO, MINDO, MNDO, AM1, PM3
Тема 2. Неэмпирический метод ab initio	Принципиальные недостатки неэмпирического метод ab initio
<b>Модуль 3. Квантово-химические расчеты физических характеристик</b>	
Тема 1. Квантово-химические расчеты физических характеристик.	Полная энергия ( $E_{tot}$ ) и энергия диссоциации ( $E_D$ ) молекул, энтальпия образования вещества.
<b>Модуль 4. Методы квантовой химии для моделирования органических реакций.</b>	
Тема 1. Методы квантовой химии для моделирования органических реакций.	Приближение МО ЛКАО. Валентное приближение. Приближение нулевого дифференциального перекрывания.

## **11. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем.**

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине наряду с традиционным чтением лекций используются информационно-коммуникационные технологии, аудитория оснащенная компьютером и видеопроектором, применяются презентации. Применяются методы активной и интерактивной форм обучения. Используется технология критического мышления, включающая знакомство с работами ведущих российских ученых, составлением конспектов, выполнением проблемного проекта. Представление проекта проходит в виде научной конференции на практическом занятии. Самостоятельная работа студентов заключается в написании рефератов с использованием современных публикаций и подготовке к дифф. зачету.

## **12. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине.**

Лаборатории кафедры оснащены установками для каталитического синтеза органических соединений, имеются лабораторные трансформаторы, бидистилляторы, рН-метр ЛП4-01, микроскопы, хроматограф - Хром -5, сушильные шкафы КС-65, реактивы, 3 компьютера и 2 узла Интернета, кондуктометры и спектрометры ИКС и КРС.

В соответствии с требованиями ГОС кафедра имеет специально оборудованные лаборатории для проведения лабораторных работ и учебные аудитории для проведения лекционных занятий по потокам студентов. Лекционные помещения укомплектованы техническими средствами обучения для проведения интерактивных занятий, в том числе и с доступом в интернет (экран настенный с электроприводом и дистанционным управлением, мультимедиа проектор с ноутбуком, проводной и дистанционный интернет). Обеспечение дисциплины осуществляется кафедрой физической и органической химии химического факультета и включает в себя приборы для физико-химического анализа (спектрофотометрия, кондуктометрия, газо-жидкостная хроматография и пр., вычислительная техника, химическое программное обеспечение (программы 3D Viever, MDL ISIS, 7.0 Origin, Hyper Chem 7.5, Gaussian 98, 03 и 09 и др). Научно-исследовательская работа проводится на кафедре физической и органической химии факультета, ее материальным техническим обеспечением является используемое кафедрой в процессе преподавания учебно-методическое обеспечение (компьютерный класс, видеопроекторы, учебное и лабораторное оборудование): Атомно-абсорбционный спектрометр, Contr AA-700, AnalytikJena, Германия; SPECORD 210 PlusBU, AnalytikJena, Германия; Система капиллярного электрофореза, Капель-105М, ЛЮМЕКС, Санкт-Петербург; Рентгеновский дифрактометр, EmpyreanSeries 2 Фирма Panalytical (Голландия); Дифференциальный сканирующий калориметр, NETZSCH STA 409 PC/PG, Германия; Лабораторная экстракционная система,

SFE1000M1-2- FMC-50, Waters, США; Хромато-масс-спектрометр, 7820 Маэстро, США, Россия; Высокоэффективный жидкостной хроматограф, Agilent 1220 Infinity, США. Для проведения качественных и количественных исследований кафедра так же пользуется центром коллективного пользования «Аналитическая спектроскопия» ДГУ.