

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

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

### МЕТОДОЛОГИЯ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЁТОВ В ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Кафедра физической и органической химии химического факультета

Образовательная программа

04.05.01 «ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ»

Профиль подготовки

Органическая химия

Уровень высшего образования  
специалитет

Форма обучения

Очная

Статус дисциплины: вариативная по выбору

Махачкала, 2017 г.

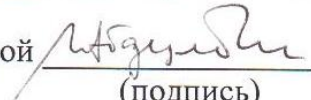
Рабочая программа дисциплины “**Методология квантово-химических расчётов в органической химии**” составлена в 2017 году в соответствии с требованиями ФГОС ВО по специальности **04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»** (уровень специалитета).

от «12» сентября 2016г. № 1174.

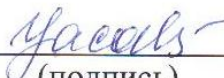
Разработчик: кафедра физической и органической химии, Сулейманов С.И., преподаватель

Рабочая программа дисциплины одобрена:

на заседании кафедры физической и органической химии  
от «23» 09 2017г., протокол № 7

Зав. кафедрой  проф. Абдулагатов И.М.  
(подпись)

на заседании Методического совета химического факультета  
от «24» 09 2017 г., протокол № 7.

Председатель  доц. Гасангаджиева У.Г.  
(подпись)

Рабочая программа дисциплины согласована с учебно-методическим управлением «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.   
(подпись)

## Аннотация рабочей программы дисциплины

Дисциплина “Методология квантово-химических расчетов в органической химии” входит в вариативную часть образовательной программы специалитета 04.05.01 - “Фундаментальная и прикладная химия” и является дисциплиной по выбору.

Дисциплина реализуется на факультете химическом кафедрой физической и органической химии.

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 соединениями и конденсированными фазами.

Дисциплина нацелена на формирование следующих компетенций выпускника: профессиональных ПК- 1, 2, 5, 7.

Преподавание дисциплины предусматривает проведение следующих видов учебных занятий: лекции, практические занятия, самостоятельная работа.

Рабочая программа дисциплины предусматривает проведение следующих видов контроля успеваемости в форме коллоквиумов, контрольных работ и промежуточный контроль в форме зачета.

Объем дисциплины 2 зачетные единицы, в том числе в академических часах по видам учебных занятий

Семес тр	Учебные занятия						СРС, в том числе экза мен	Форма промежуточной аттестации (зачет, дифференциро ванный зачет, экзамен)
	в том числе							
	Контактная работа обучающихся с преподавателем							
	Все го	из них						
Лекц ии		Лаборатор ные занятия	Практич еские занятия	КСР	консул ьтации			
8 сем.	72	14	-	14	-	-	44	зачет

### 1.1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины “Методология квантово-химических расчётов в органической химии” 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 специалитета

Дисциплина “Методология квантово-химических расчётов в органической химии” входит в вариативную часть образовательной программы по специальности 04.05.01 (020201.65) “Фундаментальная и прикладная химия” и является дисциплиной по выбору.

Изучение теории и практики начинается после прохождения студентами материала курсов “Физическая химия”, “Органическая химия” и “Квантовая химия”.

## 2. 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-1	Способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике и получать новые научные и прикладные результаты.	<b>Знать:</b> экспериментальные основы возникновения и этапы развития квантовых представлений о строении и свойствах атомов, молекул неорганических, органических и координационных соединений <b>Уметь:</b> применять методы квантовой механики для решения химических задач строения и свойств атомов и молекул, реакционных способностей молекул и механизмов реакций. <b>Владеть:</b> современными методами квантовой механики и квантовой химии, навыками применения англоязычных слов и конструкций при поиске информации, создании и работе с программами квантово-химических расчетов.
ПК-2	Владением навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований.	<b>Знать:</b> методы квантовой химии для моделирования органических реакций и свойств органических соединений. <b>Уметь:</b> пользоваться компьютерными программами HyperChem и Gaussian предназначенными для проведения квантово-химических расчетов. <b>Владеть:</b> базовыми навыками использования компьютерных программ HyperChem и Gaussian при проведении научных квантово-химических расчетов.
ПК-5	Способностью приобретать	<b>Знать:</b> современные научные



Модуль 2. Применение методов квантовой химии для моделирования органической реакции									
3	Квантово-химические расчеты физических характеристик	8		4		4		10	устный опрос, тестирование
4	Методы квантовой химии для моделирования органической реакции.	8		4		4		10	устный опрос, тестирование
	<i>Итого по модулю 2:</i>		36	8		8		20	коллоквиум
	Итого		72	14		14		44	зачет

### 4.3. Содержание дисциплины, структурированное по темам

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

Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Решение задачи о состояниях одноэлектронного атома. Угловая и радиальная задачи: сферические и радиальные функции; орбитали s-, p-, d- типа; радиальные функции распределения электронной плотности. Приближение Борна-Оппенгеймера. Электронные и ядерные функции.

##### Тема 1. Метод Хартри-Фока.

Фокиан, кулоновские и обменные операторы. Канонические уравнения Хартри-Фока и канонические орбитали. Ограниченный и неограниченный варианты метода Хартри-Фока. Приближение МО ЛКАО.

##### Тема 2. Полуэмпирические методы квантовой химии.

Приближение нулевого дифференциального перекрывания. Полное пренебрежение дифференциальным перекрыванием (CNDO). Частичное пренебрежение дифференциальным перекрыванием (INDO).

#### Модуль 2. Применение методов квантовой химии для моделирования органической реакции

Применение методов квантовой химии для моделирования органической реакции. Понятие поверхности потенциальной энергии и координаты реакции.

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

Выбор адекватного расчетного приближения. Расчеты магнитно-резонансных параметров.

**Тема 4.** Методы квантовой химии для моделирования органической реакции.

Применение методов квантовой химии для моделирования органической реакции. Изучение механизмов химических реакций.

## Лабораторные работы

№№ и названия разделов и тем	Цель и содержание лабораторной работы	Результаты лабораторной работы
Лабораторная работа №1. Уравнение Шрёдингера для атомов		
Модуль 1. Квантово-механическое описание молекулы. Тема 1. Метод Хартри-Фока.	Приближенное решение уравнения Шрёдингера для атомов, содержащих более одного электрона.	Получение общих представлений о методе Хартри-Фока.
Лабораторная работа №2. Полуэмпирические методы квантовой химии		
Модуль 1. Квантово-механическое описание молекулы. Тема 2. Полуэмпирические методы квантовой химии.	Целью является изучение основных положений полуэмпирических методов.	Получение общих знаний об полуэмпирических методах квантовой химии.
Лабораторная работа №3. Расчет распределения электронной плотности в атомах органических молекул.		
Модуль 2. Применение методов квантовой химии для моделирования органической реакции. Тема 3. Квантово-химические расчеты физических характеристик.	Целью является расчет, полуэмпирическими методами, распределения электронной плотности в атомах органических молекул.	Получение информации об распределении электронной плотности в атомах органических молекул, а также получение энергетического спектра молекулы.
Лабораторная работа №4. Расчет реакционной способности органических молекул		
Модуль 2. Применение методов квантовой химии для моделирования органической реакции. Тема 4. Методы квантовой химии для моделирования органической реакции.	Целью является изучение механизмов химических реакций.	Получение общих знаний о механизмах протекания химических реакций.

### 5. Образовательные технологии

В курсе по направлению подготовки специалистов 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 предусматривается 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 зачету.

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

Для самостоятельной работы студенты обеспечены учебниками с грифом Минобрнауки, учебными пособиями и пособиями для самостоятельной работы студентами по разделам дисциплины, подготовленными в том числе на кафедре, и Интернет-ресурсом, справочниками. Студентам рекомендуются конспектирование первоисточников и другой учебной литературы, проработка учебного материала по учебной и научной и тем, не вошедших в лекционный материал, но обязательных согласно учебной программе дисциплины. По темам разделов студенты получают контрольные вопросы и задачи для решения, выполнение которых проверяется на семинарских занятиях. На них разбираются и подробно решаются те задания, которые вызывают у студентов наибольшие затруднения, требуют дополнительной проработки. По степени выполнения домашнего задания и активности на занятии каждый студент получает рейтинговый балл. В качестве учебно-методического обеспечения студентам предоставляются контрольные вопросы и указываются учебники и пособия из списка рекомендованного списка по отдельным разделам дисциплины.

### 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. Подготовка к 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 домашнего задания	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.	Подготовка к 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.

## 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-1	<p><b>Знать:</b> экспериментальные основы возникновения и этапы развития квантовых представлений о строении и свойствах атомов, молекул неорганических, органических и координационных соединений</p> <p><b>Уметь:</b> применять методы квантовой механики для решения химических задач строения и свойств атомов и молекул, реакционных способностей молекул и механизмов реакций.</p> <p>-----</p> <p><b>Владеть:</b> современными методами квантовой механики и квантовой химии, навыками применения англоязычных слов и конструкций при поиске информации, создании и работе с программами квантово-химических расчетов.</p>	<p>Устный опрос, письменный опрос, тестирование</p> <p>Устный опрос, письменный опрос, тестирование</p> <p>-----</p> <p>Устный опрос, письменный опрос, тестирование</p>
ПК-2	<b>Знать:</b> методы квантовой химии для	Устный опрос, письменный

ПК-5	моделирования органических реакций и свойств органических соединений.	опрос, тестирование
	<b>Уметь:</b> пользоваться компьютерными программами HyperChem и Gaussian предназначенными для проведения квантово-химических расчетов.	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
	<b>Владеть:</b> базовыми навыками использования компьютерных программ HyperChem и Gaussian при проведении научных квантово-химических расчетов. <b>Знать:</b> современные научные неэмпирические и полуэмпирические методы квантовой химии. <b>Уметь:</b> анализировать научную литературу по квантово-химическим методам расчетов с целью выбора направления исследования для решения задач, имеющих естественнонаучное содержание и возникающих при выполнении профессиональных функций. <b>Владеть:</b> основами современных научных методов.	Устный опрос, письменный опрос, тестирование  Устный опрос, письменный опрос, тестирование  Письменный опрос, коллоквиум  Круглый стол, деловая игра
ПК-7	<b>Знать:</b> методы обработки результатов квантово-химических расчетов, правила подготовки и оформления научного текста.	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
	<b>Уметь:</b> методически грамотно обработать расчетные данные, сопоставить полученные данные с известными фактами, сделать выводы и оформить отчет.	Письменный опрос, коллоквиум
	<b>Владеть:</b> навыками оформления отчетов, научных публикаций, обзоров, отзывов, заключений.	Круглый стол, деловая игра, мини-конференция

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

ПК-1 – “Способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике и получать новые научные и прикладные результаты”

Уровень	Показатели (что обучающийся должен продемонстрировать)	Оценочная шкала		
		Удовлетворительно	Хорошо	Отлично
ПК-1	<b>Знать:</b> экспериментальные основы возникновения и этапы развития квантовых представлений о строении и свойствах атомов,	Демонстрирует частичные знания без грубых ошибок	Знает достаточно хорошо в базовом объеме	Демонстрирует высокий уровень знаний

	молекул неорганических, органических и координационных соединений.			
	<b>Уметь:</b> применять методы квантовой механики для решения химических задач строения и свойств атомов и молекул, реакционных способностей молекул и механизмов реакций.	Демонстрирует неполные знания без грубых ошибок	Умеет применять знания в базовом (стандартном) объеме	Демонстрирует высокий уровень умений
	<b>Владеть:</b> современными методами квантовой механики и квантовой химии, навыками применения англоязычных слов и конструкций при поиске информации, создании и работе с программами квантово-химических расчетов.	Демонстрирует частичное владение методами квантовой химии	Владеет базовыми приемами применения методов квантовой химии	Демонстрирует владение современным и методами квантовой химии на высоком уровне

ПК-2 «Владением навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований»

Уровень	Показатели (что обучающийся должен продемонстрировать)	Оценочная шкала		
		Удовлетворительно	Хорошо	Отлично
ПК-2	<b>Знать:</b> методы квантовой химии для моделирования органических реакций и свойств органических соединений.	Демонстрирует частичное знание методов квантовой химии	Владеет базовыми знаниями квантовой химии	Демонстрирует высокий уровень знаний.
	<b>Уметь:</b> пользоваться компьютерными программами HyperChem и Gaussian предназначенными для проведения квантово-химических расчетов.	Умеет пользоваться программами HyperChem и Gaussian в случае простых задач	Умеет пользоваться программами HyperChem и Gaussian в базовом объеме.	Демонстрирует высокий уровень умений
	<b>Владеть:</b> базовыми навыками использования компьютерных программ HyperChem и Gaussian при проведении научных квантово-химических расчетов.	Демонстрирует неполное владение компьютерными программами HyperChem и Gaussian	Владеет компьютерными программами HyperChem и Gaussian на среднем уровне	Владеет современными методами квантовой химии и программами расчетов HyperChem и Gaussian

ПК-5 «Способностью приобретать новые знания с использованием современных научных методов и владение ими на уровне, необходимом для решения задач, имеющих естественнонаучное содержание и возникающих при выполнении профессиональных функций»

Уровень	Показатели (что обучающийся должен продемонстрировать)	Оценочная шкала		
		Удовлетворительно	Хорошо	Отлично
ПК-5	<b>Знать:</b> современные научные неэмпирические и полуэмпирические методы квантовой химии.	Демонстрирует частичные знания математического аппарата квантовой химии	Хорошо знает математический аппарат квантовой химии	Демонстрирует знание математического аппарата квантовой химии на высоком уровне
	<b>Уметь:</b> анализировать научную литературу по квантово-химическим методам расчетов с целью выбора направления исследования для решения задач, имеющих естественнонаучное содержание и возникающих при выполнении профессиональных функций.	Умеет анализировать научную литературу по квантово-химическим методам расчетов для несложных задач	Умеет анализировать научную литературу по квантово-химическим методам расчетов для задач средней трудности	Умеет анализировать научную литературу по квантово-химическим методам расчетов для сложных задач
	<b>Владеть:</b> основами современных научных методов.	Демонстрирует неполное владение основами современных научных методов	Владеет современным и методами расчетов реакций и современной информацией на среднем уровне	Демонстрирует владение на высоком уровне квантово-химическими методами расчетов и современной информацией.

ПК-7 «Готовностью представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовых докладов, рефератов и статей в периодической научной печати)»

Уровень	Показатели (что обучающийся должен продемонстрировать)	Оценочная шкала		
		Удовлетворительно	Хорошо	Отлично
ПК-7	<b>Знать:</b> методы обработки результатов квантово-химических расчетов, правила подготовки и оформления научного	Частично знает методы обработки результатов	Знает методы обработки результатов квантово-химических	Хорошо знает методы обработки результатов квантово-химических

текста.	квантово-химических расчетов. Допускает незначительные ошибки при подготовке и оформлении научного текста.	расчетов. Допускает технические и оформительские ошибки при подготовке и оформлении научного текста.	расчетов, правила подготовки и оформления научного текста.
<b>Уметь:</b> методически грамотно обработать расчетные данные, сопоставить полученные данные с известными фактами, сделать выводы и оформить отчет.	Частично умеет обработать расчетные данные. Вызывает затруднение сопоставление полученных данных с известными фактами. Умеет сделать выводы и оформить отчет под контролем (преподавателя)	Умеет обработать расчетные данные по образцу, сопоставить полученные данные с известными фактами, сделать выводы и оформить отчет	Умеет методически грамотно и самостоятельно обработать расчетные данные, сопоставить полученные данные с известными фактами, сделать выводы и оформить отчет
<b>Владеть:</b> навыками оформления отчетов, научных публикаций, обзоров, отзывов, заключений.	Частично владеет навыками оформления отчетов, научных публикаций, обзоров, отзывов, заключений.	Владеет навыками оформления отчетов, научных публикаций, обзоров, отзывов, заключений.	Свободно владеет навыками оформления отчетов, научных публикаций, обзоров, отзывов, заключений.

### Примерная тематика 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.

## **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 (зачет). Текущий контроль осуществляется в виде устного опроса, тестирования, проведения коллоквиума, обсуждения реферата, проверки домашнего задания.

Оценка текущего контроля включает 70 баллов:

- активность на семинарском занятии (20 баллов),
- выполнение домашнего задания (20 баллов),
- тестирования на семинарах (30 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 “Методология квантово-химических расчётов в органической химии”, изучавшимся в процессе семестра. Среднее число баллов по всем модулям, которое дает право получения положительной оценки с итоговым контролем знаний – 51 и выше.

## **Вопросы по текущему контролю**

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.

## **Контрольные вопросы к итоговому контролю**

Билеты к итоговому контролю формируются из вопросов к текущему контролю и задачам. В каждый билет входят 4 вопроса – 2 по теории и 2 задачи.

## Тестовые задания

- 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 –  $\text{H}_2$ 
  - $\text{H}_2\text{O}$
  - транс- $\text{CH}_2\text{Cl}=\text{CH}_2\text{Cl}$
  - цис- $\text{CH}_2\text{Cl}=\text{CH}_2\text{Cl}$
  - $\text{O}_3$
- 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
- HF
  - RHF
  - UHF
  - CIS
  - NO
- 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
  - учётом интеграла перекрывания
  - 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 перекрывания
  - 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 перекрывания 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 заселённости 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  $2\rho_{aa}$
- 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

#### **7.4. Методические материалы, определяющие процедуру оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.**

Общий результат выводится как интегральная оценка, складывающаяся из текущего контроля - 70% и промежуточного контроля - 30%.

Текущий контроль по дисциплине включает:

- посещение занятий - 5 баллов,
- участие на практических занятиях - 70 баллов,
- выполнение домашних (аудиторных) контрольных работ - 35 баллов.

Промежуточный контроль по дисциплине включает:

- устный опрос - 30 баллов,
- письменная контрольная работа - 30 баллов,
- тестирование - 30 баллов.

#### **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-moscow.ru/ftp\\_share/\\_books/fragments/fragment\\_20477.pdf](http://www.academia-moscow.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 литература:**

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. Электронные образовательные ресурсы сервера ДГУ [elib.dgu.ru](http://elib.dgu.ru)
2. Российская информационная сеть - [www.chem.msu.ru](http://www.chem.msu.ru)
3. <http://quant.distant.ru/>

### **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 для самостоятельной работы
Модуль 1. Квантово-механическое описание молекулы Тема 1. Метод Хартри-Фока.	Решение задачи о состояниях одноэлектронного атома. Получение волновых функций атомных орбиталей 1s, 2p, 3p и т.д. Приближение МО ЛКАО.
Модуль 1. Квантово-механическое описание молекулы Тема 2. Полуэмпирические методы квантовой химии.	Использование основных полуэмпирических методов квантовой химии для описания молекул алкенов и аренов, с помощью соответствующих компьютерных программ.
Модуль 2. Применение методов квантовой химии для моделирования органической реакции Тема 3. Квантово-химические расчеты физических характеристик	Расчёт на специальных компьютерных программах физико-химических характеристик органических соединений.
Тема 4. Методы квантовой химии для моделирования органической реакции.	Изучение механизмов химических реакций на основании данных о распределении электронной плотности в молекулах органических соединений.

**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 “Методология квантово-химических расчётов в органической химии” используются следующие информационные технологии:

- Занятия компьютерного тестирования.
- Демонстрационный материал применением проектора и интерактивной доски.
- Компьютерные программы для статистической обработки результатов анализа.
- Программы пакета Microsoft Office

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

В соответствии с требованиями ФГОС ВПО кафедра имеет специально оборудованную учебную аудиторию для проведения лекционных занятий, которая укомплектована техническими средствами обучения (экран настенный с электроприводом и дистанционным управлением, мультимедиа проектор с ноутбуком).

На кафедре имеются специальные компьютерные программные комплексы (HyperChem, Gaussian) для проведения различных квантово-химических расчетов органических молекул.