

Минобрнауки России
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, 2018 г.

Рабочая программа дисциплины “Квантово-химические расчеты реакционной способности органических молекул” составлена в 2018 году в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 Химия (уровень магистратура).
от «23» сентября 2015 г. №1042.

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

Рабочая программа дисциплины одобрена:
на заседании кафедры физической и органической химии
от «29» мая 2018 г., протокол № 10
Зав. кафедрой Абдулагатов И.М. (подпись) проф. Абдулагатов И.М.

на заседании Методической комиссии химического факультета
от «22» июня 2018 г., протокол № 10.
Председатель Гасангаджиева У.Г. (подпись) доц. Гасангаджиева У.Г.

Рабочая программа дисциплины согласована с учебно-методическим управлением « 28 » 06 2018 г. Абду (подпись)

Аннотация рабочей программы дисциплины

Дисциплина “Квантово-химические расчеты реакционной способности органических молекул” входит в вариативную часть дисциплин по выбору образовательной программы Б1.В.ДВ.5.2 магистратуры по направлению подготовки 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:

Семе- стр	Учебные занятия							Форма про- межуточной аттестации (зачет, диф- ференциро- ванный зачет, экзамен
	в том числе							
	Контактная работа обучающихся с преподавателем						СРС, в том числе экза- мен	
Все го	Лек- ции	Лабора- торные занятия	Практ. заня- тия	КСР	Кон- сульт			
4	144	8	20	-	-	-	116	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 ОПОП магистратуры

Дисциплина “Квантово-химические расчеты реакционной способности органических молекул” входит в вариативную часть дисциплин по выбору образовательной программы Б1.В.ДВ.5.2 магистратуры по направлению подготовки 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)

Код компетенции из ФГОС ВО	Формулировка компетенции из ФГОС ВО	Планируемые результаты обучения
ПК-2	владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии	Знает: - основы квантовой механики, - обобщенные закономерности смежных с химией естественнонаучных дисциплин и способах их использования при решении профессиональных задач в органической химии.
		Умеет: - строить молекулярные молекулы в методах МО ЛКАО и МОХ, - устанавливать симметрию МО исходных веществ, переходного состояния и продуктов реакции.
		Владеет: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области - владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии
ПК-3	готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований	Знает: - теоретические основы органической, физической и квантовой химии, - современные квантово-химические методы оценки реакционной способности органических соединений
		Умеет: - использовать современную теорию сохранения орбитальной симметрии в перicyклических реакций при проведении научных исследований; - применять индексы реакционной способности молекул для предсказания и объяснения механизмов реакций.
		Владеет: - в полном объеме теорией стереоспецифичности перicyклических реак-

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- мест р	Не- деля се- мест ра	Виды учебной работы, включая самостоятель- ную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Са мо ст оя тель на я ра бо та	Формы текущего контроля успевае- мости (по неделям семестра) Форма промежу- точной аттестации (по семестрам)
				Л е к.	Пра кт. зан.	Л аб .за ня ти я			
Модуль 1. Квантово-механическое описание молекулы									
1	Метод Хартри-Фока.	3		2		4		30	Устный опрос, письменный опрос, тестирова- ние
	Итого по модулю 1	36		2		4		30	коллоквиум
Модуль 2. Методы квантовой химии.									
2	Полуэмпирические методы квантовой химии.	3		1		4		12	Устный опрос, письменный опрос, тестирова- ние
3	Неэмпирический ме- тод ab initio	3		1		4		14	Устный опрос, письменный опрос, тестирова- ние
	Итого по модулю 2	36		2		8		26	коллоквиум
Модуль 3. Квантово-химические расчеты физических характеристик									
4	Квантово-химические расчеты физических характеристик	3		2		4		30	Устный опрос, письменный опрос, тестиро- вание
	Итого по модулю 3	36		2		4		30	коллоквиум
Модуль 4. Методы квантовой химии для моделирования органических реакций									
5	Методы квантовой хи- мии для моделирова- ния органических ре- акций.	3		2		4		30	Устный опрос, письменный опрос, тестиро- вание
	Итого по модулю 4	36		2		4		30	коллоквиум
	Итого:	144		8		20		116	диф.зачет

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

4.3.1. Содержание лекционных занятий по дисциплине

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.

4.3.2. Содержание лабораторно-практических занятий по дисциплине

№	Содержание лабораторной работы	Часы
Модуль 1. Квантово-механическое описание молекулы		
1	Лабораторная работа №1. Полуэмпирический квантово-химический расчет гетероциклических молекул. Проведение предварительного молекулярно-механического методом ММ+ и основного полуэмпирического квантово-химического расчета методом MNDO в синглетном основном состоянии органических циклических молекул с помощью комплекса HyperChem и физико-химическая интерпретация полученных результатов.	4
Модуль 2. Методы квантовой химии		
2	Лабораторная работа №2. Полуэмпирический квантово-химический расчет органических молекул методом AM1. Проведение полуэмпирического квантово-химического расчета методом AM1 в синглетном основном состоянии органических молекул с помощью комплекса HyperChem.	4
3	Лабораторная работа №3. Полуэмпирический квантово-химический расчет органических молекул методом PM3. Проведение полуэмпирического квантово-химического расчета методом PM3 в синглетном основном состоянии органических молекул с помощью комплекса HyperChem.	4
Модуль 3. Квантово-химические расчеты физических характеристик		
4	Лабораторная работа №4. Определение центров нуклеофильной и электрофильной атаки в ряду моно- и ди-замещенных бензолов. Используя данные квантово-химических расчетов (заряды на атомах)	4

	изучить положение нуклеофильных и электрофильных центров в молекуле монозамещенного бензола. Используя данные зарядового распределения предсказать направление последующего замещения по принципу согласованной ориентации для ди-замещенных бензолов.	
Модуль 4. Методы квантовой химии для моделирования органических реакций		
5	Лабораторная работа №5. Изучение механизма электроциклических процессов на примере 1,3-бутадиена. Конротаторный и дисротаторный тип электроциклизации. Используя данные квантово-химических расчетов (вид уравнений, описывающих ВЗМО и НСМО) изучить возможность двух типов электроциклизации 1,3-бутадиена.	4

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 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 диф.зачету.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

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 7.2, 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.

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.

Код компетенции из ФГОС ВО ПК-2	Наименование компетенции из ФГОС ВО	Знания, умения, навыки	Процедура освоения
	Владением теорией квантовой химии и навыками практи-	Знает: - основы квантовой механики, - обобщенные закономерности	Устный опрос, письменный опрос, тести-

ПК-3	ческой работы с полуэмпирическими квантово-химическими методами.	смежных с химией естественнонаучных дисциплин и способах их использования при решении профессиональных задач в органической химии. Умеет: - строить молекулярные молекулы в методах МО ЛКАО и МОХ, - устанавливать симметрию МО исходных веществ, переходного состояния и продуктов реакции. Владеет: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области - владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии	рование Письменный опрос, коллоквиум Круглый стол, деловая игра
	Готовностью использовать современную аппаратуру (компьютеры и специальные программные комплексы) при проведении научных исследований	Знает: - теоретические основы органической, физической и квантовой химии, - современные квантово-химические методы оценки реакционной способности органических соединений	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
		Умеет: - 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
		Владеет: - в полном объеме теорией стереоспецифичности перициклических реакций.	Круглый стол, деловая игра

7.2. Типовые контрольные задания

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- $\text{CH}_2\text{Cl}=\text{CH}_2\text{Cl}$
 - цис- $\text{CH}_2\text{Cl}=\text{CH}_2\text{Cl}$
 - 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
 - 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 КВ)
 - 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 $2P_{\alpha\alpha}$
- 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; σ - и π - 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 MOX.
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.

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 π -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.

7.3. 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.Минкин, Б.Я.Симкин, Р.М.Миняев. Теория строения молекул (Электронные оболочки) [Текст]: М.: Высшая школа, 1997, 407 с.
2. В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций [Текст]. М.: Химия, 1986, 246 с.
3. Кузин Э.Л. Квантово-химические модели органических реагентов и комплексов в спектрофотометрическом анализе [Электронный ресурс]: монография / Кузин Э.Л. – Электрон. текстовые данные. – Калининград: Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта, 2007.– 387 с.– Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/23846.html>.

б) Дополнительная

1. Т. Кларк. Компьютерная химия [Текст]. - М.: Мир, 1990. - 383с
2. Газенаур, Е.Г. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам : учебное пособие / Е.Г. Газенаур, Л.В. Кузьмина, В.И. Крашенинин. - Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2012. - 56 с. - ISBN 978-5-8353-1298-6; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678>.
3. Шабанов О.М. Математические начала квантовой химии. - Махачкала, Изд-во «Эпоха», 2003. – 310 с.

9. Перечень ресурсов информационно — телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

1. eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]: электронная библиотека / Науч. электрон. б-ка. - Москва, 1999 - . Режим доступа: <http://elibrary.ru/defaultx.asp>

2. Moodle [Электронный ресурс]: система виртуального обучения: [база данных] / Даг. гос. ун-т. – Махачкала, г. – Доступ из сети ДГУ или, после регистрации из сети ун-та, из любой точки, имеющей доступ в интернет. – URL: <http://moodle.dgu.ru>
3. Электронный каталог НБ ДГУ [Электронный ресурс]: база данных содержит сведения о всех видах лит, апоступающих в фонд НБ ДГУ/Дагестанский гос. ун-т. – Махачкала, 2010 – Режим доступа: <http://elib.dgu.ru>
4. ЭБС ibooks.ru [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: <https://ibooks.ru/>
5. ЭБС book.ru [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: www.book.ru/
6. ЭБС iprbook.ru [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/31168.html>

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

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 рабо-

тами 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 ФГОС ВО 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.