

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
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

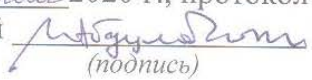
Форма обучения
Очная

Статус дисциплины: вариативная по выбору

Махачкала, 2020 г.

Рабочая программа дисциплины «Методология квантово-химических расчетов в органической химии» составлена в 2020 году в соответствии с требованиями ФГОС ВО по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия (уровень специалитета) от «12» сентября 2016 г. № 1174.

Разработчик(и): кафедра физической и органической химии, Сулейманов С.И., к.х.н.

Рабочая программа дисциплины одобрена:
на заседании кафедры физической и органической химии
от «19» февраля 2020 г., протокол № 6
Зав. кафедрой  проф. Абдулагатов И.М.
(подпись)

на заседании Методической комиссии химического факультета
от «21» февраля 2020 г., протокол № 6.
Председатель  Гасангаджиева У.Г.
(подпись)

Рабочая программа дисциплины согласована с учебно-методическим управлением «20» 03 2020 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, 4, 5, 6, 7, 10.

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

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 ОПОП 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”.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Компетенции	Формулировка компетенции из ФГОС ВО	Планируемые результаты обучения
ПК-1	Способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике и получать новые научные и прикладные результаты.	Знает: экспериментальные основы возникновения и этапы развития квантовых представлений о строении и свойствах атомов, молекул неорганических, органических и координационных соединений Умеет: применять методы квантовой механики для решения химических задач строения и свойств атомов и молекул, реакционных способностей молекул и механизмов реакций. Владеет: 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.	Знает: методы квантовой химии для моделирования органических реакций и свойств органических соединений. Умеет: пользоваться компьютерными программами HyperChem и Gaussian предназначенными для проведения квантово-химических расчетов. Владеет: базовыми навыками использования компьютерных программ HyperChem и Gaussian при проведении научных квантово-химических расчетов.
ПК-4	Способность участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати)	Знает: основы культуры речи; пользования вычислительной техникой; возможности программных пакетов общего назначения для представления результатов научных исследований. Умеет: создавать и редактировать файлы Microsoft Office (Word, Excel и Power Point); представлять полученные результаты в виде файлов Microsoft Office (Word, Excel и Power Point) с заданным оформлением. Владеет: навыками представления результатов научных исследований в виде стендовых докладов, использования компьютерной техники для набора текстов и простейшей графики.
ПК-5	Способностью приобретать новые знания с использованием современных научных методов и владение ими на уровне, необходимом для решения задач,	Знает: современные научные неэмпирические и полуэмпирические методы квантовой химии. Умеет: анализировать научную литературу по квантово-химическим методам расчетов с целью выбора направления исследования для решения задач, имеющих естественнонаучное

	имеющих естественнонаучное содержание и возникающих при выполнении профессиональных функций	содержание и возникающих при выполнении профессиональных функций. Владеет: основами современных научных методов.
ПК-6	Способностью определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения, брать на себя ответственность за результат деятельности	Знает: проблемы, задачи и методы научных исследований; общие и частные проблемы квантово-химических расчетов; современные методы обработки результатов. Умеет: получать информацию на основе научного анализа, эмпирических данных; обобщать полученные результаты в контексте ранее накопленных в науке знаний; формулировать выводы и практические рекомендации на основе результатов исследований. Владеет: методами отбора литературных данных для выполнения самостоятельных исследований; современными компьютерными технологиями.
ПК-7	Готовностью представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовых докладов, рефератов и статей в периодической научной печати)	Знает: методы обработки результатов квантово-химических расчетов, правила подготовки и оформления научного текста. Умеет: методически грамотно обработать расчетные данные, сопоставить полученные данные с известными фактами, сделать выводы и оформить отчет. Владеет: навыками оформления отчетов, научных публикаций, обзоров, отзывов, заключений.
ПК-10	Готовностью планировать деятельность работников, составлять директивные документы, принимать решения и брать на себя ответственность за их реализацию	Знает: общие и частные закономерности процесса обучения теоретической химии. Умеет: применять знания в процессе решения образовательной и профессиональной деятельности; выбирать для своей исследовательской работы смежную проблематику. Владеет: способами совершенствования профессиональных знаний и умений; технологиями приобретения, использования и обновления знаний; основополагающими терминами и понятиями, связанными с методикой преподавания квантовой химии.

4. Объем, структура и содержание дисциплины.

4.1. Объем дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 академических часов

4.2. Структура дисциплины.

№ п/п	Разделы и темы дисциплины	Семе стр	Нед еля сем ест ра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Самост оятельн ая работа	Формы текущего контроля успеваемости (<i>по неделям семест ра</i>) Форма промежуточной аттестации (<i>по семест рам</i>)
				Ле кц ии	Пра ктич ески е заня тия	Лаб орато рные заня тия	Контр оль самос т. раб.		
	Модуль 1. Квантово-механическое описание молекулы								
1	Метод Хартри-Фока.	8		2		2		14	устный опрос, тестирование
2	Полуэмпирические методы квантовой химии.	8		4		4		14	устный опрос, тестирование
	<i>Ит ого по модулю 1:</i>	3 6		6		6		24	коллоквиум
	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>Ит ого по модулю 2:</i>	3 6		8		8		20	коллоквиум
	Итого	72		14		14		44	зачет

4.3. Содержание дисциплины, структурированное по темам

4.3.1. Содержание лекционных занятий по дисциплине.

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.

4.3.2. Содержание лабораторно-практических занятий по дисциплине

№	Содержание лабораторной работы	Часы
Модуль 1. Квантово-механическое описание молекулы		
1	Лабораторная работа №1. Уравнение Шрёдингера для атомов. Целью является приближенное решение уравнения Шрёдингера для атомов, содержащих более одного электрона.	2
2	Лабораторная работа №2. Полуэмпирические методы квантовой химии. Целью является изучение основных положений полуэмпирических методов.	4
Модуль 2. Применение методов квантовой химии для моделирования органической реакции		
1	Лабораторная работа №3. Расчет распределения электронной плотности в атомах органических молекул. Целью является расчет, полуэмпирическими методами, распределения электронной плотности в атомах органических молекул.	4
2	Лабораторная работа №4. Расчет реакционной способности органических молекул. Целью является изучение механизмов химических реакций.	4

5. Образовательные технологии

Освоение программы предусматривает аудиторные занятия (лекции, семинары и практические работы), включающие интерактивные формы освоения учебного материала и самостоятельную работу, связанную с применением методов органического синтеза для решения проблем диссертационного исследования. Для повышения усвоения материала лекции сопровождаются визуальными материалами в виде слайдов, подготовленных с использованием современных компьютерных технологий (программный пакет презентаций Microsoft Office Powerpoint), проецируемых на экран с помощью видеопроектора, а также результатов компьютерного моделирования физико-химических процессов. Практическое закрепление полученных знаний поводится в научной лаборатории в ходе участия обучаемых в научной работе и выполнения исследовательских проектов. Виды самостоятельной работы: в домашних условиях, в библиотеке, на компьютерах с доступом к базам данных и ресурсам Интернет, в лабораториях с доступом к лабораторному оборудованию и приборам. Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, учебное и научное программное обеспечение. В ходе самостоятельной работы проводится анализ

литературных данных, составление подборки статей из научных журналов по применению методов органического синтеза для получения биоорганических соединений.

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. 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.

Код компетенции из ФГОС ВО	Наименование компетенции из ФГОС ВО	Знания, умения, навыки	Процедура освоения
ПК-1	Способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике и получать новые научные и прикладные результаты.	Знает: экспериментальные основы возникновения и этапы развития квантовых представлений о строении и свойствах атомов, молекул неорганических, органических и координационных соединений Умеет: применять методы квантовой механики для решения химических задач строения и свойств атомов и молекул, реакционных способностей молекул и механизмов реакций.	Устный опрос, письменный опрос, тестирование Устный опрос, письменный опрос, тестирование
		Владеет: современными методами квантовой механики и квантовой химии, навыками применения англоязычных слов и конструкций при поиске информации, создании и работе с программами квантово-химических расчетов.	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
ПК-2	Владением навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований.	Знает: методы квантовой химии для моделирования органических реакций и свойств органических соединений.	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
		Умеет: пользоваться компьютерными программами HyperChem и Gaussian предназначенными для проведения квантово-химических расчетов.	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
		Владеет: базовыми навыками использования компьютерных программ HyperChem и Gaussian при проведении научных квантово-химических расчетов.	Устный опрос, письменный опрос, тестирование

ПК-4	Способность участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати)	Знает: основы культуры речи; пользования вычислительной техникой; возможности программных пакетов общего назначения для представления результатов научных исследований.	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
		Умеет: создавать и редактировать файлы Microsoft Office (Word, Excel и Power Point); представлять полученные результаты в виде файлов Microsoft Office (Word, Excel и Power Point) с заданным оформлением.	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
		Владеет: навыками представления результатов научных исследований в виде стендовых докладов, использования компьютерной техники для набора текстов и простейшей графики.	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
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	Знает: современные научные неэмпирические и полуэмпирические методы квантовой химии.	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
		Умеет: 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. Владеет: основами современных научных методов.	Письменный опрос, коллоквиум Круглый стол, деловая игра
ПК-6	Способностью определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения, брать на себя ответственность за результат деятельности.	Знает: проблемы, задачи и методы научных исследований; общие и частные проблемы квантово-химических расчетов; современные методы обработки результатов.	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
		Умеет: получать информацию на основе научного анализа, эмпирических данных; обобщать полученные результаты в контексте ранее накопленных в науке знаний; формулировать выводы и практические рекомендации на основе	Письменный опрос, коллоквиум

ПК-7	Готовностью представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовых докладов, рефератов и статей в периодической научной печати)	результатов исследований. Владеет: методами отбора литературных данных для выполнения самостоятельных исследований; современными компьютерными технологиями. Знает: методы обработки результатов квантово-химических расчетов, правила подготовки и оформления научного текста. Умеет: методически грамотно обработать расчетные данные, сопоставить полученные данные с известными фактами, сделать выводы и оформить отчет. Владеет: навыками оформления отчетов, научных публикаций, обзоров, отзывов, заключений.	Круглый стол, деловая игра Устный опрос, письменный опрос, тестирование Письменный опрос, коллоквиум
ПК-10	Готовностью планировать деятельность работников, составлять директивные документы, принимать решения и брать на себя ответственность за их реализацию	Знает: общие и частные закономерности процесса обучения теоретической химии. Умеет: применять знания в процессе решения образовательной и профессиональной деятельности; выбирать для своей исследовательской работы смежную проблематику. Владеет: способами совершенствования профессиональных знаний и умений; технологиями приобретения, использования и обновления знаний; основополагающими терминами и понятиями, связанными с методикой преподавания квантовой химии.	Круглый стол, деловая игра, мини-конференция Устный опрос, письменный опрос, тестирование Письменный опрос, коллоквиум Круглый стол, деловая игра, мини-конференция

7.2. Типовые контрольные задания.

Вопросы по текущему контролю

Модуль 1. Квантово-механическое описание молекулы

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.

Модуль 2. Применение методов квантовой химии для моделирования органической реакции

1. Общие представления о полуэмпирических методах квантовой химии.
2. Выбор адекватного расчетного приближения для расчет физических характеристик.
3. Анализ заселенностей; расчет зарядов на атомах и порядков связей.
4. Моделирование химических реакций.
5. Понятие поверхности потенциальной энергии и координаты реакции.
6. Электронные параметры атомов и связей в методе MOX.
7. Теоремы об АУ (с иллюстрацией).
8. Поляризуемости атомов и связей. Расчет $\pi_{1,1}$ в молекуле бутадиена.
9. Индексы реакционной способности молекулы.
10. МО триметиленметана и вычисление индекса свободной валентности молекул.
11. Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения.

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.

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.

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 – H₂
 - H₂O
 - транс-CH₂Cl=CH₂Cl
 - цис-CH₂Cl=CH₂Cl
 - O₃
- 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

- HXΦ
 - 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
- OXΦ
 - B3LYP
 - MP2
 - RHF
 - МКССП
- 17) Среди перечисленных методов полуэмпирическими являются
- PM3
 - RHF
 - AM1
 - OXΦ
 - 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 объёму 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

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): М.: Высшая школа, 1997, 407 с.
2. В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. 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>.
4. Степанов, Николай Федорович. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. для студ. хим. фак. ун-тов / Степанов, Николай Федорович. - М.: Мир: Изд-во МГУ, 2001. - 519 с. - (Теоретические основы химии). - ISBN 5-03-00341-5: 0-0.

б) Дополнительная литература:

1. Т. Кларк. Компьютерная химия. - М.: Мир, 1990. - 383с.
2. Шабанов О.М. Математические начала квантовой химии. - Махачкала, Изд-во «Эпоха», 2003
3. 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>
4. Жидкомиров Г.М. Прикладная квантовая химия: Расчеты реакционной способности и механизмов химических реакций / Г. М. Жидкомиров; А.А.Багатурьян, И.А.Абронин. - М.: Химия, 1979. - 296 с. - 0-0

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) Электронный каталог НБ ДГУ [Электронный ресурс]: база данных содержит сведения о всех видах лит, поступающих в фонд НБ ДГУ/Дагестанский гос. ун-т. – Махачкала, 2010 – Режим доступа: <http://elib.dgu.ru>

- 3) 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/>
- 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 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.
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:

1. Программа для ЭВМ Microsoft Imagine Premium, 3 years, Renewal. Производитель: Microsoft Corporation Товарный знак: Майкрософт Корпорейшн (Microsoft®) Страна происхождения: Ирландия. Контракт №188-ОА, «21» ноября 2018 г.
2. Acrobat Professional 9 Academic Edition и Acrobat Professional 9 DVD Set Russian Windows ГК №26-ОА от «07» декабря 2009 г
3. ChemOffice Professional AcademicEdition (приложение № 2 к Государственному контракту №26-ОА от «07» декабря 2009 г.)
4. Statistica for Windows v.6 Russian Education , по ГК №26-ОА от «07» декабря 2009 г.
5. Avogadro 1.2.0n ПО для визуализации данных квантово-химических расчетов – свободный доступ

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

В соответствии с требованиями ФГОС ВО 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.