

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Томский государственный педагогический университет»
(ТГПУ)

УТВЕРЖДАЮ

Декан биолого-химического факультета


подпись

Минич А.С., д.б.н., профессор

«26» мая 2016 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ
МЕТОДОВ РАСЧЕТА В ХИМИИ

Направление подготовки (специальность): 44.04.01 Педагогическое образование
код наименование

Направленность (профиль): Химическое образование

Форма обучения: очная

1. Место учебной дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 44.04.01 «Педагогическое образование» и учебных планов, утвержденных Ученым советом ТГПУ, по направленности (профилю) Химическое образование.

Дисциплина «Использование квантово-химических методов расчета в химии» относится к обязательным дисциплинам вариативной части образовательной программы (ОП).

Для освоения дисциплины студенты используют знания, умения и виды деятельности, сформированные в процессе изучения химии в системе бакалавриата.

«Использование квантово-химических методов расчета в химии» является основой для более детального изучения электронного строения, пространственных структур молекул в области неорганической и органической химии, механизмов органических реакций.

2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОП

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование и развитие профессиональной компетенции: способностью анализировать результаты научных исследований, применять их при решении конкретных научно-исследовательских задач в сфере науки и образования, самостоятельно осуществлять научное исследование (ПК-5).

В результате изучения дисциплины обучающийся должен:

знать: область применения квантово-химических методов расчета электронной структуры молекул химических веществ, используемых в органической и неорганической химии; сущность, точность современных расчетных методов квантовой химии и их приложений к проблемам структуры молекул и механизмов химических реакций;

владеть: навыками интерпретации полученных расчетных данных и проводить анализ на их основе; навыками проведения конкретных полуэмпирических и неэмпирических расчетов молекул и химических реакций для установления структуры и реакционной способности молекул;

уметь:

применять полученные результаты научных исследований при решении конкретных научно-исследовательских задач в сфере науки и образования в будущей профессиональной деятельности, а также при выполнении курсовых и дипломных работ.

3. Содержание учебной дисциплины (модуля)

3.1. *Основные положения квантовой механики.* Постулаты квантовой механики. Соотношения неопределенностей. Вариационный метод. Теория возмущений.

3.2. *Строение атома. Одноэлектронный атом. Многоэлектронные атомы.* Уравнение Шредингера для атома водорода. Атомные орбитали. Метод самосогласованного поля Хартри. Метод Хартри-Фока. Приближенные аналитические функции атомных орбиталей. Орбитали Слетера-Зенера. Двухэкспоненциальные и гауссовские орбитали. Энергетические уровни многоэлектронных атомов. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. Квантовые числа многоэлектронного атома. Термы многоэлектронного атома. Электронные спектры.

3.3. *Теория химической связи.* Приближение Борна-Оппенгеймера. Метод валентных связей. Метод молекулярных орбиталей в молекулах. Приближение линейных комбинаций атомных орбиталей. Уравнения Рутаана. Выбор базисных атомных функций. Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО. МО гомоядерных двухатомных молекул. Электронные конфигурации гомоядерных молекул. МО гетероядерных двухатомных молекул. Теорема Гельмана-Фейнмана. Теорема вириала и природа химической связи. Квантово-химические расчеты в молекулярной спектроскопии. Силовые постоянные химических связей. Интенсивность полос поглощения в ИК-спектрах.

3.4. *Поверхности потенциальной энергии (ППЭ) молекул.* Пути и энергетика химической реакции. ППЭ и динамика химических реакций. ППЭ электронно-возбужденных состояний. Колебания молекул. Гармонические колебания молекул. Расчет термодинамических функций. Оптимизация геометрических параметров.

3.5. *Расчетные методы квантовой химии. Полуэмпирические методы расчета.* Полуэмпирические методы расчета. Основные требования к полуэмпирическим методам. Приближение нулевого дифференциального перекрывания. Инвариантность полуэмпирических методов. Параметризации методов полного пренебрежения дифференциальным перекрыванием (ППДП/2, ППДП/С). Параметризация методов частичного пренебрежения дифференциальным перекрыванием (ЧПДП, МЧПДП/3). Методы пренебрежения двухатомным дифференциальным перекрыванием (AM1, PM3, MPДП). Метод Паризера-Парра-Поппла (ППП). Расширенный метод Хюккеля.

3.6. *Неэмпирические методы расчета.* Неэмпирическая теория молекулярных орбиталей. Базисные ряды атомных орбиталей. Слетеровские функции. Контрактационные функции Гаусса. Поляризационные и диффузные функции. Расщепленные валентные орбитали. Эффективные потенциалы остова. Критерии сходимости. Системы с открытыми оболочками. Краткий обзор неэмпирической теории: энергия, геометрия, зарядовое распределение. Включение электронной корреляции в теорию МО. Многоконфигурационная теория поля. Конфигурационное взаимодействие. Теория возмущения. Кластерная теория. Методы параметризации.

3.7. *Электрические свойства молекул.* Дипольный момент. Межмолекулярное притяжение. Внутри- и межмолекулярные взаимодействия. Электрические свойства молекул и межмолекулярные силы. Постоянный дипольный момент, поляризуемость. Виды межмолекулярных сил притяжения. Пространственное отталкивание и Ван-дер-Ваальсовы радиусы. Теория смещения электронных пар. Индуктивный и мезомерный эффекты с точки зрения квантовой химии.

3.8. *Донорно-акцепторные комплексы.* Равновесие молекула-димер. Водородная связь. Теория строения комплексных соединений. Теория локализованных молекулярных орбиталей. Кристаллическая теория поля. Теория поля лигандов. Октаэдрические и тетраэдрические комплексные соединения. Дативное и донорно-акцепторное взаимодействие.

3.9. *Кислоты и основания. Принцип ЖМКО.* Кислоты и основания Льюиса и Бренстеда. Жесткие и мягкие кислоты и основания. Принцип жестких и мягких кислот и оснований (ЖМКО). Применение принципа ЖМКО. Теоретическое обоснование принципа ЖМКО. Жесткость и мягкость кислот и оснований, применение в органической химии. Взаимодействие граничных орбиталей. Электростатическое взаимодействие.

3.10. *Теория возмущения молекулярных орбиталей.* Возмущение первого и второго порядка. Энергетические составляющие взаимодействия молекул. Граничные орбитали. Электронная корреляция. Метод конфигурационного взаимодействия. Метод теории возмущений.

3.11. *Учет сольватации в квантово-химических расчетах.* Классификация моделей. Сольватонная модель. Модель самосогласованного поля реакции. Приближение супермолекулы.

4. Трудоемкость дисциплины (модуля) по видам учебных занятий, самостоятельной работы обучающихся и формам контроля
Объем в зачётных единицах 3

4.1.1. Виды учебных занятий, самостоятельная работа обучающихся, формы контроля (в академических часах)

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам (в академических часах)
		3 семестр
Лекции		-
Лабораторные работы	76	76
Практические занятия (Семинары)		-
Самостоятельная работа	32	32
Курсовая работа		-
Другие виды занятий		-
Формы текущего контроля		тестирование
Формы промежуточной аттестации		зачет
Итого часов	108	108

4.1.2. Содержание учебной дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Всего часов	Аудиторные занятия (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1	Основные положения квантовой механики.				12	4
2	Строение атома. Одноэлектронный атом. Многоэлектронные атомы.				4	4
3	Теория химической связи.				8	2
4	Поверхности потенциальной энергии (ППЭ) молекул.				8	4
5	Расчетные методы квантовой химии. Полуэмпирические методы расчета.				4	4
6	Неэмпирические методы расчета. Неэмпирическая теория молекулярных орбиталей.				8	4
7	Электрические свойства молекул.				4	2
8	Донорно-акцепторные комплексы.				4	2
9	Кислоты и основания. Принцип ЖМКО.				8	2
10	Теория возмущений молекулярных орбиталей.				12	2
11	Учет сольватации в квантово-химических расчетах.				4	2
	Всего за 3 семестр:				76	32

4.1.3. Лабораторный практикум

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Наименование лабораторной работы
1	Основные положения квантовой механики.	1. Построение молекул и оптимизация структуры в программе HyperChemProb. 2. Методы молекулярной механики, полуэмпирические методы расчета. 3. Знакомство с базами данных по спектроскопии и термодинамическим характеристикам соединений различных классов.
2	Строение атома. Одноэлектронный атом. Многоэлектронные атомы.	4. Расчет термодинамических величин и молекулярных орбиталей полуэмпирическими методами.
3	Теория химической связи.	5. Расчет ИК-спектров молекул с использованием HyperChem6. 6. Расчет УФ-спектров молекул с использованием HyperChem6.
4	Поверхности потенциальной энергии (ППЭ) молекул.	7. Сравнение устойчивости изомеров винилового спирта. 8. Расчет термодинамических параметров изодесмических реакций с использованием программы Gaussian03, Spartan, ADF неэмпирическими методами.
5	Расчетные методы квантовой химии. Полуэмпирические методы расчета.	9. Расчет ЯМР характеристик алканов, алкенов, алкинов, ароматических соединений.
6	Неэмпирические методы расчета. Неэмпирическая теория молекулярных орбиталей.	10. Поиск переходного состояния реакции переноса протона в молекуле оксиметилена 11. Расчет переходных состояний химических реакций методом квадратичного синхронного транзита QST2.
7	Электрические свойства молекул.	12. Анализ рассчитанных ИК- и Рамановских спектров.
8	Донорно-акцепторные комплексы.	13. Оценка устойчивости донорно-акцепторных комплексов различных типов.
9	Кислоты и основания. Принцип ЖМКО.	14. Оценка энергетической щели между ВЗМО донора и НСМО акцептора как критерий возможности донорно-акцепторного взаимодействия. 15. Расчет жесткости и мягкости молекул.
10	Теория возмущений молекулярных орбиталей.	16. Расчет возбужденных состояний и УФ-спектров 17. Анализ результатов расчета натуральных валентных орбиталей. 18. Методы учета электронной корреляции
11	Учет сольватации в квантово-химических расчетах.	19. Использование растворителя при квантово-химических расчетах.

5. Перечень учебно-методического обеспечения по дисциплине (модулю)

5.1. Основная учебная литература

1. Соловьев М. Е., Соловьев М. М. Компьютерная химия. –М.: Соломон-Пресс -2005.

2. Полещук, О. Х., Кижнер Д. М. Компьютерное моделирование химических реакций : учебное пособие в 2 частях/ О. Х. Полещук. - Томск: ТГПУ, 2007, 2009. - 176, 155 с.
3. Полещук, О. Х. Компьютерное моделирование химических реакций: учебное пособие/ О. Х. Полещук, Д. М. Кижнер - Томск: ТГПУ, 2007. - 159 с.
4. Полещук, О. Х. Компьютерное моделирование химических реакций: методические указания/ О. Х. Полещук, Д. М. Кижнер - Томск: ТГПУ, 2007. - 171 с.

5.2. Дополнительная литература

1. Кларк Т. Компьютерная химия. –М.: -Мир. –1990.
2. Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Теория строения молекул. Ростов/Дон.: Феникс. -1997. -560с.
3. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир. -2001. -519с.
4. Бейдер Р. Атомы в молекулах. М.: Мир. -2001. -532с.
5. Симкин Б. Я., Клецкий М. Е., Глуховцев М. Н. Задачи по теории строения молекул. Ростов/Дон.: Феникс. -1997. -272с.
6. Реутов, Олег Александрович. Органическая химия [Текст]:учебник для вузов : в 4 ч./О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин ; МГУ.-3-е изд.-М.:БИНОМ. Лаборатория знаний.- (Классический университетский учебник). Ч. 1.-2010.-566, [1] с.:ил. .-ISBN 9785947746136:430.00.-ISBN 9785947746112
7. Реутов, Олег Александрович. Органическая химия [Текст]:учебник для вузов : в 4 ч./О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин ; МГУ.-3-е изд., испр.-М.:БИНОМ. Лаборатория знаний.- (Классический университетский учебник). Ч. 2.-2010.-622, [1] с.:ил. .-ISBN 9785947746419:430.00.-ISBN 9785947746112
8. Реутов, Олег Александрович. Органическая химия [Текст]:учебник для вузов : в 4 ч./О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин ; МГУ.-2-е изд.-М.:БИНОМ. Лаборатория знаний.- (Классический университетский учебник). Ч. 3.-2010.-543, [1] с.:ил., табл. .-ISBN 9785996302611:430.00.-ISBN 9785947746112

5.3. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети Интернет, необходимых для освоения дисциплины (модуля)

1) **Архив журнала Science**, The American Association for the Advancement of Science (AAAS) - Американская ассоциация по развитию науки - некоммерческая организация, сообщество ученых, созданное в целях поддержки науки, НП «НЭИКОН». Лицензионной договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 01.01.2012 – бессрочно. **Сумма договора:** бесплатно. **Количество ключей (пользователей):** со всех компьютеров вуза. <http://www.sciencemag.org/content/by/year#classic>

2) **Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU**. При поддержке РФФИ. Лицензионное соглашение №916 от 12.01.2004 г. на период с12.01.2004 – бессрочно. **Сумма договора:** бесплатно. **Количество ключей (пользователей):** со всех компьютеров ТГПУ. <http://elibrary.ru>

3) **Архив научных журналов 2011 Cambridge Journals Digital**. Издательство Cambridge University Press, НП «НЭИКОН». Лицензионной договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 30.03.12 - бессрочно. **Сумма договора:** бесплатно. **Количество ключей (пользователей):** со всех компьютеров вуза. <http://journals.cambridge.org/action/stream?pageId=3216&level=2>

4) **Архивы 169 журналов издательства Oxford University Press**. Издательство Oxford University Press, НП «НЭИКОН». Лицензионной договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 14.03.12 - бессрочно. **Сумма договора:** бесплатно. **Количество ключей (пользователей):** со всех компьютеров вуза. <http://www.oxfordjournals.org/>

5) **Цифровой архив электронных журналов издательства Taylor&Francis.** Издательство Taylor&Francis Group, НП «НЭИКОН». Договор №316-РН-211 от 01.09.2011 г. на период с 06.05.2013 – бессрочно. **Сумма договора:** бесплатно. **Количество ключей (пользователей):** со всех компьютеров ТГПУ. <http://arch.neicon.ru/xmlui/>

6) **УИС Россия (Университетская информационная система РОССИЯ).** Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова (Научно-исследовательский вычислительный центр, Экономический факультет), Автономная некоммерческая организация Центр информационных исследований (АНО ЦИИ). Письмо-заявка № 21/300 от 01.03.2010 г. на период с 01.03.2010 – бессрочно. **Сумма договора:** бесплатно. **Количество ключей (пользователей):** с компьютеров библиотеки ТГПУ и при индивидуальной регистрации по запросу. <http://uisrussia.msu.ru/is4/main.jsp>

7) **БД «Марс» - сводная база данных аналитической росписи статей из периодических издания (архив 2001-2006).** Ассоциация региональных библиотечных консорциумов (АРБИКОН). Договор № С/161-1/3 от 12.10.2009 г. на период с 12.10.2009 – бессрочно. **Сумма договора:** бесплатно. **Количество ключей (пользователей):** со всех компьютеров вуза. http://arbicon.ru/services/mars_analitic.html

8) **Архив журнала Nature.** Научное издательство Nature Publishing Group, НП «НЭИКОН». Лицензионный договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 27.09.12 - бессрочно. **Сумма договора:** оплата оказанных услуг производится из средств Минобрнауки. **Количество ключей (пользователей):** со всех компьютеров ТГПУ. <http://www.nature.com/nature/index.html>

9) **Архив 16 научных журналов издательства Wiley.** Издательство Wiley, издательство Taylor&Francis Group, НП «НЭИКОН». Лицензионный договор № 317.55.11.4002 от 01.09.2011 г. на период с 06.05.13 – бессрочно. <http://onlinelibrary.wiley.com/>

10) **Архив научных журналов SAGE Journals Online.** Издательство SAGE Publications, НП «НЭИКОН». Договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 05.02.2012 – бессрочно. <http://online.sagepub.com/>

11) **Архив научных журналов издательства IOP Publishing.** Издательство IOP Publishing Института физики Великобритании, НП «НЭИКОН». Договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 13.04.2012 – бессрочно. <http://iopscience.iop.org/>

12) **Архив электронных журналов Electronic Back Volume Sciences Collection издательства Annual Reviews.** Издательство Annual Reviews, НП «НЭИКОН». Договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 06.05.2013 – бессрочно. <http://www.annualreviews.org/>

13) <http://libserv.tspu.edu.ru> – Электронная библиотека ТГПУ.

14) <http://ru.wikipedia.org/wiki> – Википедия.

15) <http://scientific.narod.ru>

16) <http://abc-chemistry.org/ru/> - каталог бесплатных журналов по химии.

17) <http://dmmsclick.wileyurope.com/view.asp?m=wxjgz8yo9hujimn85zz&u=6163945&f=h> - каталог зарубежных журналов.

18) <http://www.mnr.gov.ru/>

19) <http://webbook.nist.gov/chemistry>

20) <http://www.xumuk.ru>

21) <http://www.chem.msu.su>

22) <http://www.dace.ru>

23) <http://www.hypercube.com>

24) <http://www.cambridgesoft.com>

25) <http://qcc.ru>

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

Расчетные лицензионные квантово-химические программы:

- ChemOffice'10,
- HyperChem 852,
- Gaussian'03,
- MOPAC.

Компьютерный класс с сервером и 11 терминалами.

Операционная система Linux (или Windows) с программным обеспечением Open office (или Microsoft office).

6. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Лабораторные занятия проводятся в компьютерном классе (ауд. №2), оснащенном комплектом мультимедийного оборудования с программным обеспечением, позволяющим использовать презентации, и перечисленными ниже материалами и оборудованием.

Наименование аудитории	Оснащенность аудитории
Компьютерный класс, ауд. №2 уч. корп. №7, ул. Герцена, 47.	Мультимедийное оборудование, компьютеры (13 шт.) с выходом в интернет, комплект лицензионных программ, в том числе ChemOffice, HyperChem, Gaussian.

7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Для освоения дисциплины следует ознакомиться с содержанием учебной дисциплины и перечнем вопросов, которые студенты должны будут подготовить самостоятельно, выбрать тему или вопросы из плана самостоятельной работы и принять участие в дискуссии. Перечень вопросов для промежуточной аттестации также представлен в фонде оценочных средств.

7.1 План самостоятельной работы

Общее количество часов, выносимых на самостоятельную работу, – 39 часов

№	Раздел дисциплины	Перечень вопросов	Кол-во часов	Форма контроля
1	Основные положения квантовой механики.	Энергетический спектр простейших систем: частицы в прямоугольном потенциальном ящике, гармонического осциллятора и жесткого ротатора. Классификация молекулярных орбиталей по симметрии. s- и p-орбитали. p-электронное приближение. Локализованные молекулярные орбитали. Гибридные орбитали и гибридизация.	4	тестирование
2	Строение атома. Одноэлектронный атом. Многоэлектронные атомы.	Атом водорода с точки зрения теории Бора. Уравнение Шредингера. Приближения к решению уравнения Шредингера.	4	тестирование
3	Теория химической связи.	Основные характеристики химической связи. Каковы основные типы кристаллических решеток? Каковы основные типы дефектов в реальных кристаллах?	2	тестирование
4	Поверхности по-	Определение ППЭ. Типы стационар-	4	тестирование

	тенциальной энергии (ППЭ) молекул.	ных точек на ППЭ.		ние
5	Расчетные методы квантовой химии. Полуэмпирические методы расчета.	Приближения полуэмпирических методов.	4	тестирование
6	Неэмпирические методы расчета. Неэмпирическая теория молекулярных орбиталей.	Классификация неэмпирических методов расчета.	4	тестирование
7	Электрические свойства молекул.	Природа дипольного момента. Виды межмолекулярных взаимодействий.	2	тестирование
8	Донорно-акцепторные комплексы.	Химическая связь в комплексных соединениях на основании локализованных орбиталей. Основные составляющие и основные типы межмолекулярных взаимодействий.	2	тестирование
9	Кислоты и основания. Принцип ЖМКО.	Применение принципа ЖМКО.	2	тестирование
10	Теория возмущений молекулярных орбиталей.	Возмущение первого и второго рода.	2	тестирование
11	Учет сольватации в квантово-химических расчетах.	Модели сольватации, плюсы и минусы разных подходов к описанию влияния растворителей.	2	тестирование

8. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю)


Представлен в виде отдельного документа (приложение к рабочей программе учебной дисциплины (модуля)).

Рабочая программа учебной дисциплины (модуля) составлена в соответствии с учебным планом, федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 44.04.01 Педагогическое образование, направленность (профиль) Химическое образование.

Рабочую программу учебной дисциплины (модуля) составил:
Полещук Олег Хемович, докт. хим. наук, профессор, профессор кафедры химии и методики обучения химии

Рабочая программа учебной дисциплины (модуля) утверждена на заседании кафедры химии и методики обучения химии ТГПУ

Протокол № 6 от 26 мая 2016 года.

Заведующий кафедрой химии и методики обучения химии,
 А.Е. Иваницкий

Рабочая программа учебной дисциплины (модуля) одобрена учебно-методической комиссией биолого-химического факультета

Протокол № 5 от «26» мая 2016 года.

Председатель учебно-методической комиссии
биолого-химического факультета,
канд. хим. наук, доцент

 Е.П. Князева