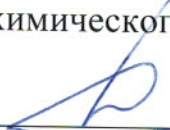


МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ТГПУ)

«Утверждаю»
Декан биолого-химического факультета

Дырин В. А.

« 3 » 09 2012г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

**М.2.В.04 ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ
В ХИМИИ**

ТРУДОЕМКОСТЬ (В ЗАЧЕТНЫХ ЕДИНИЦАХ) 3

Направление подготовки: 050100.68 Педагогическое образование

Магистерская программа: Химическое образование

Квалификация (степень) выпускника: магистр

1. Цели изучения дисциплины:

Основная цель изучения курса использование квантово-химических расчетов в химии - получение знаний студентов в области теории строения атомов и молекул для их использования при проведении квантово-химических расчетов химических объектов.

Глубокие знания основ моделирования в химии необходимы магистрантам для описания структуры и физико-химических свойств различных химических соединений, в частности биологически активных в тонком органическом синтезе и в химико-фармацевтической промышленности на достаточно высоком научном уровне. Известно, что современная химическая наука уделяет большое внимание исследованию строения молекул и описанию природы связи в них. При этом наряду с интенсивно развивающимися экспериментальными методами, использующими новейшие достижения физики, все более активно привлекаются теоретические подходы. Квантово-химические расчеты являются источником многих модельных представлений, используемых современной химической теорией. Именно в рамках этой науки нашел объяснение феномен образования химической связи. Задачей данного курса является научить магистрантов проведению полуэмпирических расчетов на уровне, который доступен магистрантам биолого-химического факультета.

2. Место учебной дисциплины в структуре основной образовательной программы.

Дисциплина «Использование квантово-химических расчетов в химии» относится к вариативной (профильной) части профессионального цикла Основной образовательной программы (Б.3).

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

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

Дисциплина «Использование квантово-химических расчетов в химии» относится к разделу М.2.В.04 Профессиональный цикл.

3. Требования к уровню освоения дисциплины.

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование и развитие специальных компетенций (СК), а также профессиональных компетенций (ПК-1, ПК-2, ПК-6, ПК-11, ПК-13), общекультурных компетенций (ОК-1, ОК-4, ОК-6-9, ОК-16). Освоивший дисциплину «Использование квантово-химических расчетов в химии» должен

- владеть:

основными принципами построения химических соединений (СК, ОК-1, ОК-4, ПК-11, ПК-13);

- быть способным:

составить электронную формулу любой молекулы (СК, ОК-4, ПК-11, ПК-13);

проводить конкретные полуэмпирические и неэмпирические расчеты молекул и химических реакций для установления структуры и реакционной способности соединений (СК, ОК-1, ПК-11, ПК-13);

- **понимать** возможности использования современных компьютерных квантово-химических программ ChemOffice, HyperChem, Gaussian (СК, ОК-1, ПК-13);

- **уметь применять** полученные знания:

для объяснения природы взаимодействия молекул в процессе химических реакций (СК);

в педагогической деятельности (ПК-1, ПК-2, ПК-11, ПК-13);

- **быть готовым** к самостоятельному проведению исследований, постановке компьютерного эксперимента, использованию информационных технологий для решения научных и профессиональных задач, анализу и оценке результатов теоретических исследований (СК, ПК-11, ПК-13).

В результате изучения дисциплины студент 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 на основе использования современных компьютерных квантово-химических программ ChemOffice, HyperChem, Gaussian, Spartan, ADF;

уметь:

- применять полученные знания и навыки при выполнении курсовых и дипломных работ и в будущей профессиональной деятельности.

4. Общая трудоемкость дисциплины (модуля) и виды учебной работы. 4. Общая трудоемкость дисциплины 3 зачетных единиц и виды учебной работы.

Вид учебной работы	Трудоемкость: зачетные единицы, часы (в соответствии с учебным планом) Всего: 3 зачетных еди-	Распределение по семестрам, часы (в соответствии с учебным планом)			
		2	3		

	ности – 108 часов			
Аудиторные занятия	22		22	
Лекции				
Практические занятия (ПЗ)	22		22	
Семинары (С)				
Лабораторные работы (ЛР)				
В интерактивной форме	10		10	
Самостоятельная работа	86		86	
Курсовой проект (работа)				
Расчетно-графические работы				
Реферат				
Формы текущего контроля			Коллоквиумы, контрольные работы, тестирование	
Вид итогового контроля (зачет, экзамен)			зачет	

5. Содержание учебной дисциплины

5.3. Практикум.

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование работ
1	1	Знакомство с программами ChemOffice, HyperChemPro6. Построение молекул, оптимизация структуры, методы молекулярной механики, полуэмпирические методы расчета.
2	2	Расчет термодинамических величин и молекулярных орбиталей полуэмпирическими методами.
3	3	Расчет ИК и УФ-спектров с использованием HyperChem Pro 6.
4	4	Знакомство с программами Gaussian98, Spartan, ADF для расчета неэмпирическими методами.
5	5	Расчет ЯМР характеристик алканов, алкенов, алкинов, ароматических соединений.
6	6	Расчет переходных состояний химических реакций.
7	7	Анализ рассчитанных спектров ИК- и Рамановских.
8	8	Расчет термодинамических параметров изодесмических реакций.
9	9	Расчет возбужденных состояний и УФ-спектров.
10	10	Анализ результатов расчета натуральных валентных орбиталей и использование растворителя.
11	11	Знакомство с базами данных по спектроскопии и

6. Учебно-методическое обеспечение дисциплины.

6.1. Основная литература:

1. 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.
2. Полещук, О. Х. Компьютерное моделирование химических реакций: учебное пособие/ О. Х. Полещук, Д. М. Кижнер - Томск: ТГПУ, 2007. - 159 с.
3. Полещук, О. Х. Компьютерное моделирование химических реакций: методические указания/ О. Х. Полещук, Д. М. Кижнер - Томск: ТГПУ, 2007. - 171 с.

6.2. Дополнительная литература:

1. Соловьев М. Е., Соловьев М. М. Компьютерная химия. –М.: Соломон-Пресс -2005.
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. Гордон А., Форд Р. Спутник химика. –М.: Мир. -1976.
7. Кларк Т. Компьютерная химия. –М.: -Мир. –1990.

6.3. Средства обеспечения освоения дисциплины:

<http://www.mnr.gov.ru/>
<http://webbook.nist.gov/chemistry>
<http://en.wikipedia.org>
<http://bse.pnl.gov>
<http://www.xumuk.ru>
<http://www.chem.msu.su>
<http://www.dace.ru>
<http://www.hypercube.com>
<http://www.cambridgesoft.com>
<http://qcc.ru>
<http://scientific.narod.ru>

6. 4. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Расчетные лицензионные квантово-химические программы: ChemOffice'10, HyperChem852, Gaussian'03, МОРАС.

Компьютерный класс с сервером и 11 терминалами.

7. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины

7.1. Методические рекомендации (материалы) преподавателю:

Реализация компетентностного подхода должна предусматривать широкое использование в учебном процессе активных и интерактивных форм проведения занятий (семинаров в диалоговом режиме, дискуссий, рецензирования магистрантами работ друг друга, оппонирования магистрантами рефератов, экспертных оценок группами магистрантов совместно с преподавателями и работодателями, компьютерных симуляций, деловых и ролевых игр, разбора конкретных ситуаций, психологических и иных тренингов, групповых дискуссий, работы магистрантских исследовательских групп, вузовских телеконференций) в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития профессиональных навыков обучающихся.

В рамках учебных курсов должны быть предусмотрены встречи с представителями российских и зарубежных компаний, государственных и общественных организаций, мастер-классы экспертов и специалистов.

7.2. Методические рекомендации для магистрантов: Для освоения дисциплины следует ознакомиться с содержанием разделов (5.2.) и перечнем вопросов, которые магистранты должны будут подготовить самостоятельно (8.2), написать реферат по одной из предлагаемых тем (8.1), выбрать тему (8.3) совместно с другими магистрантами, обучающимися по специальности «Использование квантово-химических расчетов в химии», и принять участие в дискуссии. Перечень вопросов для промежуточной аттестации представлен в разделе 8.5.

8. Формы текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся.

8.1. Тематика рефератов (докладов, эссе):

1. Компьютерное моделирование
2. Полуэмпирические методы расчета
3. Атом водорода и многоэлектронные атомы
4. Базисные функции
5. Неэмпирические методы расчета
6. Метод линейных комбинаций атомных орбиталей
7. Метод молекулярных орбиталей
8. Метод Хюккеля
9. Схемы приближений эффективных зарядов на атомах
10. Электронная корреляция
11. Межмолекулярные взаимодействия.

8.2. Вопросы и задания для самостоятельной работы, в том числе групповой самостоятельной работы обучающихся:

1. Основные постулаты квантовой механики. Волновые функции и их свойства.
2. Оператор Гамильтона и уравнение Шредингера для молекулярных систем.
3. Волновые функции (орбитали) для атома водорода.
4. В чем заключается адиабатическое приближение? Электронное и ядерное волновые уравнения.
5. Что такое поверхность потенциальной энергии молекулы и каковы её основные характерные особенности?
6. В чем заключается метод Хартри–Фока для решения электронного уравнения?
7. Атомные и молекулярные орбитали. Что это такое?
8. Заряды на атомах и порядки связей. Какую информацию они дают о структуре и свойствах молекулы? Полярность химической связи и её характеристики.
9. Какую информацию о свойствах молекулы можно получить, если известна симметрия её равновесной конфигурации?
10. Метод функционала плотности, его основные особенности.
11. Что Вы знаете о современных полуэмпирических методах квантовой химии?
12. Метод Хюккеля. Привести пример расчета этим методом какой-либо простой молекулярной системы (бутадиен, циклобутадиен, метиленциклопропен, бензол).
13. Путь реакции и координата реакции на потенциальной поверхности. Что это такое?
14. Привести примеры точечных групп симметрии молекул.

8.3. Вопросы для самопроверки, диалогов, обсуждений, дискуссий, экспертиз:

1. Основные положения классической теории химического строения. Структурная формула и граф молекулы. Изомерия. Конформации молекул. Связь строения и свойств молекул.
2. Физические основы учения о строении молекул
3. Механическая модель молекулы. Потенциалы парных взаимодействий. Методы молекулярной механики и молекулярной динамики при анализе строения молекул.
4. Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Стационарное уравнение Шредингера для свободной молекулы. Адиабатическое приближение. Электронное волновое уравнение.
5. Потенциальные кривые и поверхности потенциальной энергии. Их общая структура и различные типы. Равновесные конфигурации молекул. Структурная изомерия. Оптические изомеры.

6. Колебания молекул. Нормальные колебания, амплитуды и частоты колебаний, частоты основных колебательных переходов. Колебания с большой амплитудой.

7. Вращение молекул. Различные типы молекулярных волчков. Вращательные уровни энергии.

8.4. Перечень вопросов для промежуточной аттестации (к зачету):

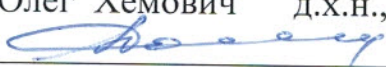
1. Электронное строение атомов и молекул. Одноэлектронное приближение. Атомные и молекулярные орбитали. Электронные конфигурации и термы атомов. Правило Хунда. Электронная плотность. Распределение электронной плотности в двухатомных молекулах. Корреляционные орбитальные диаграммы.
2. Теорема Купманса. Пределы применимости одноэлектронного приближения.
3. Интерпретация строения молекул на основе орбитальных моделей и исследования распределения электронной плотности. Локализованные молекулярные орбитали. Гибридизация.
4. Электронная корреляция в атомах и молекулах. Ее проявления в свойствах молекул. Метод конфигурационного взаимодействия.
5. Представления о зарядах на атомах и порядках связей. Различные методы выделения атомов в молекулах. Корреляции дескрипторов электронного строения и свойств молекул. Индексы реакционной способности. Теория граничных орбиталей.
6. Точечные группы симметрии молекул. Понятие о представлениях групп и характерах представлений. Общие свойства симметрии волновых функций и потенциальных поверхностей молекул. Классификация квантовых состояний атомов и молекул по симметрии. Симметрия атомных и молекулярных орбиталей, σ - и π -орбитали. π -Электронное приближение.
7. Влияние симметрии равновесной конфигурации ядер на свойства молекул и их динамическое поведение. Орбитальные корреляционные диаграммы. Сохранение орбитальной симметрии при химических реакциях.
8. Дипольный момент и поляризуемость молекул. Магнитный момент и магнитная восприимчивость. Эффекты Штарка и Зеемана. Магнитно-резонансные методы исследования строения молекул. Химический сдвиг.
9. Оптические спектры молекул. Вероятности переходов и правила отбора при переходах между различными квантовыми состояниями молекул. Связь спектров молекул с их строением. Определение структурных характеристик молекул из спектроскопических данных.
10. Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий. Молекулярные комплексы. Ван-дер-ваальсовы молекулы. Кластеры атомов и молекул. Водородная связь. Супермолекулы и супрамолекулярная химия.
11. Строение молекул простых и координационных неорганических соединений. Полядерные комплексные соединения. Строение основных типов орга-

нических и элементоорганических соединений. Соединения включения. Полимеры и биополимеры.

12. Симметрия кристаллов. Кристаллографические точечные группы симметрии, типы решеток, сингонии. Понятие о пространственных группах кристаллов. Индексы кристаллографических граней.

Программа составлена в соответствии с государственным образовательным стандартом высшего профессионального образования по направлению 050100.62 Педагогическое образование профиль химия
(указывается номер и наименование направления подготовки (специальности))


Программу составили:

Полещук Олег Хемович д.х.н., профессор кафедры органической химии ТГПУ 

Программа утверждена на заседании кафедры органической химии ТГПУ протокол № 6 от «28» июня 2012 г.

Заведующий кафедрой органической химии  О. Х. Полещук

Рабочая программа одобрена методической комиссией биолого-химического факультета ТГПУ «Э» сентябрь 2012г. протокол № 4

Председатель методической комиссии БХФ  Е.П. Князева