

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ



УТВЕРЖДАЮ:

профессор по научно-методической
и учебной работе

_____ Е.И. Скафа

_____» апреля 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

«КВАНТОВАЯ ХИМИЯ»

Направление подготовки:	04.04.01 Химия
Магистерская программа:	химия
Образовательная программа:	академическая магистратура
Квалификация:	магистр
Форма обучения:	<u>очная</u> , очно-заочная, заочная

Донецк 2020

УТВЕРЖДАЮ:

Декан химического факультета

А.В. Белый

«16» апреля 2020 г.



Программа составлена на основании Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования (ФГОС ВО) направления подготовки 04.04.01 Химия, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации № 655 от 13 июля 2017 г.;

Порядка организации учебного процесса в образовательных организациях высшего профессионального образования Донецкой Народной Республики, утвержденного приказом Министерства образования и науки ДНР № 1171 от «10» ноября 2017 г.;

учебного плана и основной образовательной программы высшего профессионального образования направления подготовки 04.04.01 Химия, разработанных в ГОУ ВПО «Донецкий национальный университет».

Разработчик:

Доцент кафедры физической химии,
к.х.н., доцент

Н.А. Туровский

Программа учебной дисциплины утверждена на заседании кафедры физической химии.

Протокол № 13 от «28» марта 2020 г.

Заведующий кафедрой

В.М. Михальчук

Программа учебной дисциплины одобрена учебно-методической комиссией химического факультета

Протокол № 3 от «15» апреля 2020 г.

Председатель учебно-методической
комиссии факультета

Н.В. Яблочкова

1. ОБЛАСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ И МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ

Дисциплина «Квантовая химия» относится к вариативной части (Б1.В.ДВ.3) учебного плана по направлению подготовки 04.04.01 Химия (магистерская программа Химия). Дисциплина реализуется на химическом факультете кафедрой физической химия. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими и сопутствующими дисциплинами: неорганическая, органическая, физическая химия. Дисциплина «Квантовая химия» является основой для прохождения научной практики и выполнения выпускной работы магистра. Химик, после изучения данной дисциплины, должен обладать способностями и умениями самостоятельно добывать знания из различных источников, систематизировать полученную структурную информацию. Формирование такого умения происходит за счет участия обучающихся в занятиях, выполнения контрольных заданий и тестов, выполнения лабораторных работ, написания курсовых и выпускных квалификационных работ. При этом самостоятельная работа студентов играет решающую роль в ходе всего учебного процесса.

2. СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

<i>Характеристика учебной дисциплины</i>		
Направление подготовки	04.04.01 Химия	
Магистерская программа	Химия	
Образовательная программа	академическая магистратура	
Квалификация	магистр	
Количество содержательных модулей	1	
Дисциплина базовой / вариативной части образовательной программы	вариативная часть	
Формы контроля (МК, экзамен, зачет)	1 модульный контроль, 1 экзамен	
Показатели	очная форма обучения	заочная форма обучения
Количество зачетных единиц (кредитов)	3	
Год подготовки	1	
Семестр	2	
Количество часов	108	
- лекционных	14	
- практических, семинарских	-	
- лабораторных	14	
- самостоятельной работы	80	
в т.ч. индивидуальное задание	-	
Недельное количество часов,	7.2	
в т.ч. аудиторных	2	

3. ОПИСАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели и задачи

Цель изучения дисциплины «Квантовая химия» – формирование у студентов систематических знаний современного состояния, возможностей и ограничений современной квантовой химии; дать в руки химикам - экспериментаторам инструмент исследования, который разрешил бы проводить квантово-химические исследования с использованием всех возможно-

стей современных компьютерных технологий и научить их мыслить структурными категориями в химии.

Задачи дисциплины:

- раскрыть физический смысл основных постулатов, приближений и концепций квантовой химии, научить студента видеть области применения этих приближений и концепций при решении конкретных химических проблем;
- выделить методологически важные вопросы химии и на конкретных примерах показать взаимосвязь квантовой химии с другими дисциплинами химического и естественно-научного циклов.
- развитие умений, которые помогут грамотно применять методы квантовой химии при решении различных задач, дать в руки будущим специалистам-экспериментаторам инструмент, который позволил бы проводить квантово-химические исследования с использованием всех возможностей современных компьютерных технологий квантовой химии при решении типичного цикла задач: расчеты геометрических характеристик молекул; построение карт распределения электронной плотности вдоль разных сечений в пространстве молекулы; расчеты дипольных моментов и энергий ионизации молекул; расчеты поверхности потенциальной энергии химических реакций.

Требования к результатам освоения дисциплины: Процесс изучения дисциплины «Квантовая химия» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО РФ направления подготовки 04.04.01 Химия и основной образовательной программы высшего профессионального образования направления подготовки 04.04.01 Химия (магистерская программа: химия):

универсальные компетенции:

- способность осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий (УК-1);
- способность управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла (УК-2);
- способность организовывать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной цели (УК-3);
- способность применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранных языках, для академического и профессионального взаимодействия (УК-4);
- способность анализировать и учитывать разнообразие культур в процессе межкультурного взаимодействия (УК-5);
- способность определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки (УК-6).

общепрофессиональные компетенции:

- способность выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения (ОПК-1);
- способность анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук (ОПК-2);
- способность использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности (ОПК-3);
- способность готовить публикации, участвовать в профессиональных дискуссиях, представлять результаты профессиональной деятельности в виде научных и научно-популярных докладов (ОПК-4).

профессиональные компетенции, соответствующие виду (видам) профессиональной деятельности, на которые ориентирована программа магистратуры:

научно-исследовательская деятельность:

- способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты (ПК-1);
- владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии (ПК-2);
- готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований (ПК-3);
- способностью 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) (ПК-4);
- организационно-управленческая деятельность:*
 - владением навыками составления планов, программ, проектов и других директивных документов (ПК-5);
 - способностью определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения, брать на себя ответственность за результат деятельности (ПК-6);
- научно-педагогическая деятельность:*
 - владением методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования (ПК-7).

В результате изучения учебной дисциплины студент должен:

знать:

- основные положения квантовой теории;
- теоретические основы квантовохимических методов;
- основные параметры электронного строения молекул;
- современную теорию химической связи.

уметь:

- выбирать квантовохимический метод, который способен решить поставленную (типичную) задачу;
- расчет геометрических характеристик жестких молекул;
- расчет зарядов на атомах;
- построение карт распределения электронной плотности вдоль разных перерезов в пространственные молекулы, анализ на этой основе характера химических связей;
- расчет энергий ионизации молекулярных систем;
- расчет молекулярного электростатического потенциала молекул;
- расчет теплот реакций;
- расчет поверхностей и путей химических реакций;
- выполнять квантовохимические расчеты пространственного строения и физико-химических свойств простейших молекул с помощью программного пакета;
- интерпретировать и использовать результаты квантовохимических расчетов;
- *ориентироваться* в круге основных проблем современной квантовой химии.

Владеть:

- навыками применения основных положений квантовой химии для анализа свойств химических соединений.
- навыками применения основных методологий современных компьютерных технологий квантовой химии;
- навыками совершенствования и развития своего научного потенциала.

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ И ФОРМЫ ОРГАНИЗАЦИИ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Порядковый номер и наименование темы	Краткое содержание темы
<i>Содержательный модуль 1</i>	
<p>Тема 1. Концептуальные основы, состояние и становление квантовой химии.</p>	<p>Первые шаги, развитие и состояние квантовой химии. Предмет квантовой химии. Объекты квантовой химии. Квантовая механика и квантовая химия. Противоречие между классической структурной химией и квантовой химией. Появление квантовой химии. Развитие квантовой химии. Постулат Планка о квантовании уровней энергии. Постулат Эйнштейна о квантовании энергии электронов в атомах Планетарная модель строения атома – Модель Резерфорда. Теория Бора для строения атома водорода. Постулат Бора о необходимом условии стационарности электронной орбиты – силовой постулат. Постулат Бора о достаточном условии стационарности электронной орбиты – правило квантования. Условия квантования радиуса электронной орбиты. Условия квантования энергии электронной орбиты. Постулат Бора о энергии электронных переходов –правило частот. Волновая природа электронов. Постулаты и уравнения де Бройля. Волновой постулат де Бройля о стационарности электронной орбиты. Движение или состояние объектов микромира? Идея Борна: Постулаты квантовой механики. Операторы кинетической энергии для ядер и электронов многоатомной химической частицы. Операторы потенциальной энергии взаимодействия ядер, электронов, электронов и ядер химической частицы. Оператор полной энергии химических частиц.</p>
<p>Тема 2. Квантово-химические модели атомно-молекулярных химических частиц</p>	<p>Квантово-химическая модель атомов и молекул в приближении согласованного движения ядер и электронов. Стационарное уравнение Шредингера для прецизионной ядерно-электронной модели химических частиц. Модель химической частицы в приближении замороженного ядерного остова. Электронное уравнение в приближении замороженного ядерного остова химических частиц. Модель химической частицы в одноэлектронном приближении. Уравнение Шредингера в одноэлектронном приближении Хартри. Многоэлектронная волновая функция Слэтера. Модель химической частицы в приближении самосогласованного поля. Одноэлектронные уравнения Хартри – Фока. Концепция молекулярных орбиталей в квантовой химии. Атомная орбиталь, ее структура и свойства. Квантовые числа: n, l, m, s. Основные положения метода молекулярных орбиталей. Молекулярная орбиталь, ее структура и свойства. Приближение МО ЛКАО. Условия вариационной теоремы к МО. Точные и пробные МО. Базисные функции МО. Условие минимального значения энергии электрона ядерно-электронной системы состояние которого описывает МО. Методология определения энергии МО и коэффициентов при базисных функциях МО, уравнения Рутана. Вековое (секуля-</p>

	рное) уравнение.
Тема 3. Неэмпирическая, DFT- и полуэмпирическая квантовая химия.	Неэмпирическая квантовая химия. NDDO полуэмпирическая квантовая химия: AM1, RM1. PM3, PM6, PDDG приближения. DFT-квантовая химия. Орбитали Хартри — Фока. Орбитали Слейтера - Зенера. Базисные функции для неэмпирических расчетов. Орбитали гаусового типа. Одноэкспоненциальная орбиталь слэтеровского типа. Минимальные базисные наборы. Двухэкспоненциальные базисные наборы. Расширенные базисные наборы. Поляризационные и диффузные функции. Источники погрешности ССП МО ЛКАО расчетов. Общий подход к учету энергии электронной корреляции. Комбинированные квантово-классические приближения (QM/MM).
Тема 4. Концептуальные основы, состояние и проблемы теории химической связи.	Орбитально-зарядовая концепция теории химической связи.. Основные представления орбитальной картины химической связи. Принцип орбитального соответствия. МО и орбитальное соответствие АО (методика Малликена). Энергия двухатомных взаимодействий (E_{AB}) в приближении Малликена: резонансные и обменные двухатомные взаимодействия, электростатические двухатомные взаимодействия. Параметры критических точек электронной плотности, характеризующие химическую связь. Тип критической точки электронной плотности в межъядерном пространстве химической связи. Концепция сил в теории химической связи: теорема Гельмана-Фейнмана, природа химической связи в приближении электростатической теоремы Гельмана - Фейнмана, теорема вириала, природа химической связи в приближении теоремы вириала.
Тема 5. Методология квантово-химического моделирования химических реакций.	Элементарный акт химической реакции. Теория переходного состояния химической реакции. Расчет поверхности потенциальной энергии химической реакции. Стационарные точки ППЭ элементарной реакции. Путь химической реакции. Оценка геометрии переходного состояния химической реакции. Индексы реакционной способности.. Квантовая термохимия. Метод изодесмических реакций. Определение термохимических характеристик химических частиц и энергии их диссоциации на ионы и радикалы в приближении изодесмических реакций. Неизодесмические реакции.
Тема 6. Методология квантово-химического моделирования влияния растворителя на реакционную способность химических реагентов	PCMконтинуальные модели и супермолекулярное приближение квантово-химического моделирования влияния растворителя на реакционную способность химических реагентов. Континуальная модель поляризационного действия.. Моделирование сольватных оболочек растворителя COSMO. Энергия и градиенты энергии диэлектрического экранирования растворителем молекул вещества. Полная энергия сольватированных молекулярных систем. Возможности и ограничение модели COSMO.; Методика квантовохимического моделирования действия среды на химические объекты в приближении модели COSMO. Эффекты поляризационного действия растворителя на параметры электронной структуры химических частиц.

Тема 7. Актуальные направления современной квантовой химии.	Квантовая биохимия. Квантовая медицинская химия. Квантовая экологическая химия, Квантовая химия твердого тела. Квантовая химия супрамолекулярных соединений. Квантовая нанохимия. Сканирующая зондовая микроскопия как инструмент квантовой химии. Зондовая туннельная микроскопия. Магнитно-силовая микроскопия. Электросиловая микроскопия. Ближнепольная оптическая спектроскопия.
---	---

Тематический план

Содержательный модуль 1						
Названия содержательных модулей и тем	Количество часов					
	Очная форма обучения					
	всего	в т.ч.				
		лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа
Тема 1. Концептуальные основы, состояние и становление квантовой химии.	16	2		2	12	
Тема 2. Квантово-химические модели атомно-молекулярных химических частиц	16	2		2	12	
Тема 3. Неэмпирическая, DFT- и полуэмпирическая квантовая химия.	16	2		2	12	
Тема 4. Концептуальные основы, состояние и проблемы теории химической связи.	16	2		2	12	
Тема 5. Методология квантово-химического моделирования химических реакций.	16	2		2	12	
Тема 6. Методология квантово-химического моделирования влияния растворителя на реакционную способность химических реагентов	15	2		2	11	
Тема 7. Актуальные направления современной квантовой химии.	13	2		2	9	
Итого <i>по содержательному модулю 1</i>	108	14		14	80	

5. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ЛЕКЦИОННЫХ, ПРАКТИЧЕСКИХ И ЛАБОРАТОРНЫХ ЗАНЯТИЙ

Практические занятия не предусмотрены учебным планом

ТЕМЫ ЛЕКЦИОННЫХ ЗАНЯТИЙ

<i>№ п/п</i>	<i>Название темы</i>	<i>Количество часов</i>
1.	Концептуальные основы, состояние и становление квантовой химии.	2
2.	Квантово-химические модели атомно-молекулярных химических частиц.	2
3.	Неэмпирическая, DFT- и полуэмпирическая квантовая химия.	2
4.	Концептуальные основы, состояние и проблемы теории химической связи.	2
5.	Методология квантово-химического моделирования химических реакций.	2
6.	Методология квантово-химического моделирования влияния растворителя на реакционную способность химических реагентов	2
7.	Актуальные направления современной квантовой химии.	2
	ВСЕГО	14

ТЕМЫ ЛАБОРАТОРНЫХ ЗАНЯТИЙ

<i>№ п/п</i>	<i>Название темы</i>	<i>Количество часов</i>
1.	Методология квантово - химического расчета энергии диссоциации химических соединений.	2
2.	Методология квантово - химического расчета энергии ионизации химических соединений.	2
3.	Методология квантово - химического расчета пути неизодесмических реакций.	2
4.	Методология квантово - химического расчета стандартной энтальпии образования методом изодесмических реакций.	2
5.	Методология квантово - химического расчета прочности химической связи методом изодесмических реакций.	2
6.	Методология квантово - химического расчета в приближении COS-МО модели сольватации реагентов химических реакций	2
7.	Методология QM/MM расчета объектов био- и нанохимии..	2
	ВСЕГО	14

6. МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ОРГАНИЗАЦИИ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ.

ОРГАНИЗАЦИЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

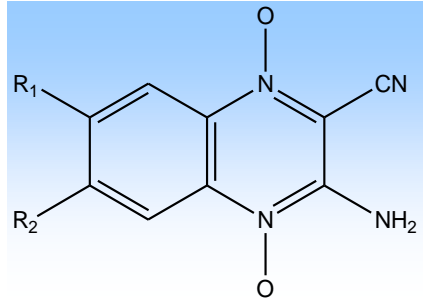
<i>№ п/п</i>	<i>Название темы</i>	<i>Количество часов</i>
1.	Концептуальные основы, состояние и становление квантовой химии.	6

	Индивидуальная работа (п. 1)	6
2.	Квантово-химические модели атомно-молекулярных химических частиц.	6
	Индивидуальная работа (п. 5).	6
3.	Неэмпирическая, DFT- и полуэмпирическая квантовая химия.	6
	Индивидуальная работа (п. 2)	6
4.	Концептуальные основы, состояние и проблемы теории химической связи.	6
	Индивидуальная работа (п. 6).	6
5.	Методология квантово-химического моделирования химических реакций.	6
	Индивидуальная работа (п. 3).	6
6.	Методология квантово-химического моделирования влияния растворителя на реакционную способность химических реагентов.	6
	Индивидуальная работа (п. 4).	6
7.	Квантовая нанохимия: концепции, состояние и перспективы.	4
	Квантовая экологическая химия: концепции, состояние и перспективы.	5
	ВСЕГО	80

7. ИНДИВИДУАЛЬНЫЕ ЗАДАНИЯ

Цель: овладеть теорией и практикой квантовой химии.

1. Выполнить квантово-химический расчет структурных параметров объектов данного ряда.

	N	R ₁	R ₂	C _{1%}	HCR	E _{pc}
	1	H	H	30	80	-0.88
	2	CH ₃	CH ₃	-	-	-0.97
	3	F	H	15	100	-0.75
	4	CF ₃	H	7	75	-0.65
	5	CF ₃ O	H	-	-	-0.73
	6	Cl	H	9	150	-0.74
	7	Cl	Cl	1	80	-0.62
	8	CN	H	11	50	-0.56
	9	F	F	1	10	-0.75
	10	Cl	F	2	10	-0.68

C_{1%} – концентрация активного вещества, необходимая для выживания 1% исследуемых клеток. HCR – соотношение цитотоксичности, определяемое как отношение между дозой в воздухе и дозой в гипоксии, необходимое для продуцирования гибели 99% клеток ткани. E_{pc} – первый потенциал восстановления, измеренный методом циклической вольтометрии в диметилформамиде.

Построить графики зависимости свойств исследуемого ряда соединений в координатах.

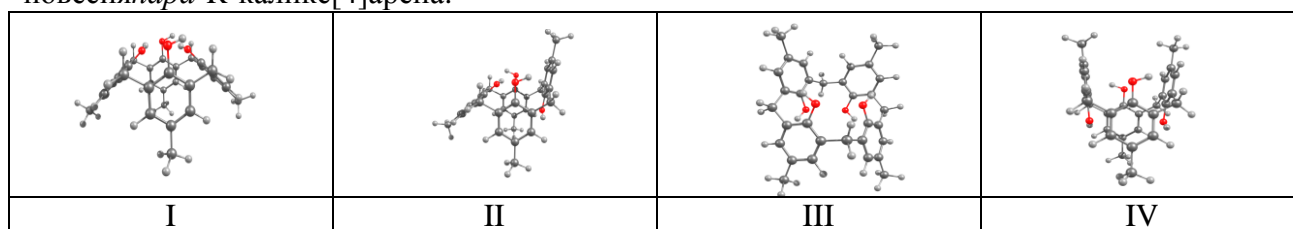
Серия 1	Серия 2	Серия 3
1. C _{1%} = f(ΔH _f ^o),	1. HCR = f(ΔH _f ^o),	1. E _{pc} = f(ΔH _f ^o),
2. C _{1%} = f(E _{ВЗМО}),	2. HCR = f(E _{ВЗМО}),	2. E _{pc} = f(E _{ВЗМО}),

3. $C_{1\%} = f(G^\circ)$,	3. $HCR = f(G^\circ)$,	3. $E_{pc} = f(G^\circ)$,
4. $C_{1\%} = f(v(N=O))$,	4. $HCR = f(v(N=O))$,	4. $E_{pc} = f(v(N=O))$,
5. $C_{1\%} = f(V_{VDW})$,	5. $HCR = f(V_{VDW})$,	5. $E_{pc} = f(V_{VDW})$,
6. $C_{1\%} = f(\log P)$,	6. $HCR = f(\log P)$,	6. $E_{pc} = f(\log P)$,
7. $C_{1\%} = f(\alpha)$.	7. $HCR = f(\alpha)$.	7. $E_{pc} = f(\alpha)$.

С помощью полученных математических выражений, связывающих свойства исследуемого ряда объектов, оцените отсутствующие экспериментальные величины потенциала и HCR для соединений 2 и 5. На основе полученных данных попытайтесь предсказать их активность как цитотоксических агентов. Сравните с величинами, полученными в задании.

2. Выполнить квантово-химический расчет структурных параметров метилового спирта. Показать: как в приближении метода МО ЛКАО рассчитываются заряды на атомах кислорода и водорода молекулы; каким образом можно определить потенциал ионизации молекулы метанола соответственно теоремы Купманса; какие молекулярные орбитали являются граничными. Какие свойства молекулы контролируются ВЗМО и соответственно НВМО? Определить базисный набор атомных орбиталей, который было использовано для построения молекулярных орбиталей.

3. Получить равновесные конфигурации *para*-R-каликс[4]арена, которые соответствуют конформерам I – IV, в приближении методов полуэмпирической квантовой химии. Выполнить расчет энтальпии образования и свободной энергии Гиббса образования в приближении метода AM1 для I – IV конформеров *para*-R-каликс[4]арена при 298 К. Определить наиболее стабильный конформер *para*-R-каликс[4]арена. Определить параметры конформационного равновесия *para*-R-каликс[4]арена.



4. Провести теоретический анализ состояния проблемы квантово-химического описания неизодесмических реакций. Получить равновесную молекулярную структуру пероксидных соединений (R_1OOR_2) и оксирадикалов (RO^\bullet), которые образуются в результате гомолитического разрыва $-O-O-$ связи исследуемого ряда пероксидов:



Провести квантово-химический расчет исследуемых объектов при температуре 298 К. Определить влияние природы заместителя на прочность пероксидной связи.

Объекты для индивидуальной работы

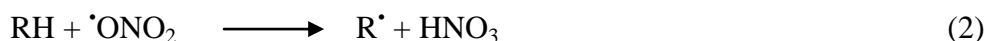
AM1 метод			RM1 метод		
вариант	R ₁	R ₂	вариант	R ₁	R ₂
	CH ₃	H	11	CH ₃	H
	C ₂ H ₅	H	12	C ₂ H ₅	H
	Ph	H	13	Ph	H
	цикло-C ₆ H ₁₁	H	14	цикло-C ₆ H ₁₁	H
	C ₁₁ H ₂₃	H	15	C ₁₁ H ₂₃	H
	CH ₃	CH ₃	16	CH ₃	CH ₃
	C ₂ H ₅	CH ₃	17	C ₂ H ₅	CH ₃
	Ph	CH ₃	18	Ph	CH ₃

	цикло-С ₆ H ₁₁	CH ₃	19	цикло-С ₆ H ₁₁	CH ₃
	C ₁₁ H ₂₃	CH ₃	20	C ₁₁ H ₂₃	CH ₃

5. Провести квантово-химическое исследование влияния природы растворителя в приближении континуальной модели COSMO на электронные и термодинамические параметры перкислных соединений, которые приведены в индивидуальной работе 4.

6. Спирты, эфиры, органические кислоты и другие соединения образуют соответствующие углеродцентрированные радикалы >C-OH. В воздухе с низким содержанием углеводородов в основном присутствуют гидроксильные (HO·) и гидропероксильные (HO₂·) радикалы, которые, реагируя с углеводородами RH и O₂, быстро могут превращаться в пероксирадикалы RO₂·.

Провести методом PM3 квантовохимический расчет реактантов и продуктов реакций 3-5 в режиме оптимизации молекулярной геометрии при 298 С. Рассчитать ΔE реакций (1-7) при 0 К. Рассчитать ΔE реакций (1-7) при 298 К. Рассчитать ΔH реакций (1-7) при 298К. Рассчитать ΔG реакции (1-7) при 298К. R = R₁ в индивидуальной работе 4.



С олефином реализуется и реакция присоединения.



8. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ К ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ.

1. Модель химической частицы в приближении Борна - Оппергеймера. Электронное уравнение Шредингера для стационарного состояния этой модели.
2. Модель химической частицы в приближении Хартри. Одноэлектронные уравнения Шредингера.
3. Модель атома и молекулы в приближении самосогласованного поля. Метод Хартри – Фока.
4. Методология НХФ (UHF) приближения квантовой химии.
5. Методология неэмпирической квантовой химии.
6. Методология полуэмпирической квантовой химии.
7. Методология DFT квантовой химии.
8. Концептуальные основы, состояние и проблемы теории химической связи
9. Методология и современные компьютерные технологии квантово - химического моделирования.
10. Квантовая нанохимия

9. ОБРАЗЕЦ ВАРИАНТА МОДУЛЬНОГО КОНТРОЛЯ И КРИТЕРИЙ ОЦЕНИВАНИЯ

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Химический факультет

Направление подготовки: **04.04.01 Химия**
 Магистерская программа: **химия**
 Программа подготовки: **академическая магистратура**
 Семестр: **2**
 Учебная дисциплина: **Квантовая химия**

МОДУЛЬНАЯ КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА

ВАРИАНТ №1

1. Методология DFT квантовой химии.
2. Концептуальные основы, состояние и проблемы теории химической связи
3. Методология и современные компьютерные технологии квантово - химического моделирования..

Утверждено на заседании кафедры физической химии,
 протокол № ____ от « ____ » _____ 20 ____ г.

Зав. кафедрой _____
 Преподаватель _____

Критерии оценивания модульного контроля

Номер задания	Количество баллов
Задание 1	10
Задание 2	10
Задание 3	10
Всего	30

9. ОБРАЗЕЦ ЭКЗАМЕНАЦИОННОГО БИЛЕТА

(теоретические вопросы к экзамену, образец билета и критерии оценивания)

Теоретические вопросы к экзамену

1. Становление и состояние квантовой химии: концептуальные основы квантовой теории частиц микромира
2. Экспериментальные доказательства сложной структуры атома и механика объектов макро- и микромира.
3. Формирование концепции квантовой теории и квантовой механики объектов микромира;
4. Постулат Планка о квантовании уровней энергии.
5. Постулат Эйнштейна о квантовании энергии электронов в атомах
6. Энергия и импульс фотонов.
7. Законы сохранения энергии и импульса фотонов.
8. Планетарная модель строения атома.
9. Теория Бора для строения атома водорода: орбитальная модель атома; постулаты о стационарности электронной орбиты; радиус и энергия электронной орбиты.
10. Постулат Бора о энергии электронных переходов.
11. Волновая природа электронов. Постулаты и уравнения де Бройля.

12. [Принцип неопределённости Гейзенберга.](#)
13. Движение и состояние объектов микромира - постулат Борна.
14. Концепции и перспективы квантовой механики молекул
15. Постулат о способе описания состояния объектов микромира.
16. Постулат об антисимметричных свойствах функции состояния ансамбля объектов микромира.
17. Постулат о суперпозиции состояний объектов микромира.
18. Постулат о способе определения функции состояния ансамбля объектов микромира: временное уравнение Шредингера.
19. Стационарное состояние химических частиц вещества.
20. Стационарное уравнение Шредингера: получить из постулированного уравнения Шредингера.
21. Квантовомеханические операторы:
22. Оператор энергии частицы микромира - гамильтониан.
23. Оператор импульса и его действие.
24. Оператор координаты и его действие.
25. Оператор времени и его действие.
26. Действие пары операторов на функцию.
27. Свойства квантовомеханических операторов;
28. Линейные операторы.
29. Коммутирующие операторы.
30. Эрмитовы операторы.
31. Операторное уравнение на собственные значения.
32. Постулат о способе получения уравнений квантовой механики.
33. Одномерный оператор кинетической энергии микрочастицы.
34. Трёхмерный оператор кинетической энергии объектов микромира.
35. Оператор потенциальной энергии взаимодействия объектов микромира.
36. Оператор полной энергии объектов микромира.
37. Постулат о среднем значении оператора Гамильтона стационарного уравнения Шредингера.
38. Уравнение Шредингера для электронно - ядерной модели атомов и молекул
39. Динамическая ядерно-электронная модель атома. Уравнение Шредингера для стационарного состояния этой модели.
40. Динамическая ядерно-электронная модель многоатомной химической частицы. Уравнение Шредингера для стационарного состояния этой модели.
41. Модель химической частицы в приближении Борна - Оппергеймера. Электронное уравнение Шредингера для стационарного состояния этой модели.
42. Модель химической частицы в приближении Хартри. Одноэлектронные уравнения Шредингера.
43. Многоэлектронная волновая функция Слэтера.
44. Модель атома и молекулы в приближении самосогласованного поля. Метод Хартри – Фока.
45. Концептуальные основы метода молекулярных орбиталей
46. Атомная орбиталь.
47. Молекулярная орбиталь.
48. Приближение МО-ЛКАО (метод Рутаана).
49. Точные и пробные МО, вариационная теорема.
50. Базисные функции.
51. Валентное приближение квантовой химии: валентные и невалентные электроны; ядерно-электронный остов.
52. Методология НХФ (UHF) приближения квантовой химии.
53. Методология ОХФ (RHF) приближения квантовой химии.

54. Структура блока МО химической частицы: общее число МО; принцип заполнения МО электронами в UHF и RHF приближении квантовой химии; число заполненных электронами и вакантных МО; граничные МО; ВЗМО и НВМО.
55. Квантово-химическая информативность блока МО химической частицы; Характеристики донорно-акцепторных свойств – энергия ИЗМО и НВМО; орбитальный потенциал ионизации и орбитальное сродство к электрону молекулярной частицы в соответствии с теоремой Купманса; распределение электронной плотности в химических частицах; заряд на атомах химических частиц в приближении метода МО; электронная плотность на атомах химических частиц в приближении метода МО; электронная заселенность атомных орбиталей химических частиц в приближении метода МО; порядок химической связи в приближении метода МО.
56. Энергия химических соединений – источник информации о их строении и свойствах: критерий равновесного состояния; критерий процесса самосогласования МО.
57. Энергия ионной или радикальной диссоциации химических соединений.
58. Энергия вертикальной и адиабатической ионизации химических соединений - потенциал ионизации и сродство к электрону.
59. Энергетика электронных переходов – внутренней и интеркомбинационной конверсии, флуоресценции и фосфоресценции.
60. Энергия активации химических реакций.
61. Неэмпирическая, DFT- и полуэмпирическая квантовая химия
62. Методология неэмпирической квантовой химии.
63. Методология полуэмпирической квантовой химии.
64. Методология DFT квантовой химии.

65. Концептуальные основы, состояние и проблемы теории химической связи
66. Классическая электронная теория химической связи:
67. концепция электрохимического дуализма в теории химической связи;
68. концепция валентности в теории химической связи;
69. ионная концепция в теории химической связи;
70. концепция электронных пар в теории химической связи.
71. Орбитально - электростатическая концепция в теории химической связи:
72. принцип соответствия атомных орбиталей в теории химической связи;
73. двухатомные взаимодействия в приближении орбитально–электростатической концепции.
74. Концепция Гельмана-Фейнмана о силах ядерно-электронных взаимодействий в молекулах.
75. Методология и современные компьютерные технологии квантово - химического моделирования
76. GAUSSIAN, GAMESS, HyperChem, MOPAC – комплексы программ структурной химии. Их возможности и ограничения.
77. HyperChem методика создания и редактирование модели химических соединений.
78. HyperChem методология квантовохимического расчета.
79. Квантовохимический расчет соединений с открытой оболочкой.
80. Электронно-возбужденное состояние химических частиц.
81. Электронное строение химических соединений.
82. Распределение электронной плотности в химических частицах.
83. Энергия диссоциации химической связи.
84. Энергия ионизации химических частиц.
85. Энергия образования молекул из атомов.
86. Компьютерная спектроскопия: GAUSSIAN, GAMESS, MOPAC, HyperChem – колебательная спектроскопия.
87. Квантово-химическое описание реакций в газовой фазе
88. Методология квантовохимического моделирования с учетом эффекта сольватации объектов.

89. Квантовая супрамолекулярная химия
90. Квантовая биохимия
91. Квантовая медицинская химия: фармацевтический аспект
92. Квантовая химия твердых тел.
93. Квантовая нанохимия.

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Химический факультет

Направление подготовки: **04.04.01 Химия**
 Магистерская программа: **химия**
 Программа подготовки: **академическая магистратура**
 Семестр: **2**
 Учебная дисциплина: **Квантовая химия**

БИЛЕТ №1

1. Квантовая супрамолекулярная химия
2. Квантовая биохимия
3. Квантовая медицинская химия: фармацевтический аспект.
4. Концепция Гельмана-Фейнмана о силах ядерно-электронных взаимодействий в молекулах.

Утверждено на заседании кафедры физической химии.

Протокол № ____ от «__» _____ 20__ года

Заведующий кафедрой _____

Экзаменатор _____

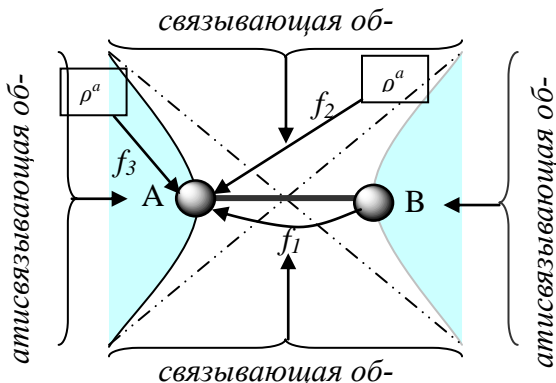
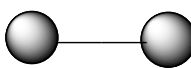
Критерии оценивания экзамена

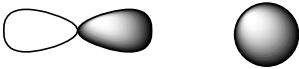
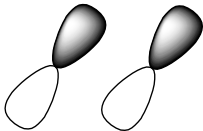
Номер задания	Количество баллов
Задание 1	25
Задание 2	25
Задание 3	25
Задание 4	25
Всего	100

11. ОБРАЗЕЦ ТЕСТОВОГО ЗАДАНИЯ

В приведенных тестах укажите правильный ответ (правильных вариантов ответа один или несколько).

1.	<p>Проанализировать структуру МО (ψ_1)</p> $\psi_1 = \dots + c_{11}\phi_{S(A)} + c_{12}\phi_{S(B)} + \dots$ <p>и определить тип вклада в образование химической связи s – АО, которые центрированы на атомах А и В.</p> <p>а. связывающий вклад; б. антисвязывающий вклад. в. несвязывающий вклад.</p>	
----	--	--

2.	 <p>Граничная поверхность, которая разделяет связывающую и антисвязывающую области, определяется условием:</p> <p>а. $f_2 = f_1 + f_3$; б. $f_2 = f_3$; в. $f_1 + f_2 + f_3 = 0$.</p>	
3.	<p>Проанализировать структуру МО (ψ_2)</p> $\Psi_2 = \dots - c_{21}\phi_{px(A)} + c_{22}\phi_{px(B)} + \dots$ <p>и определить тип вклада в образование σ-химической связи р – АО, которые центрированы на атомах А и В.</p> <p>а. связывающий вклад; б. антисвязывающий вклад; в. несвязывающий вклад.</p>	
4.	<p>Проанализировать структуру МО (ψ_2)</p> $\Psi_2 = \dots - c_{21}\phi_{px(A)} + c_{22}\phi_{px(B)} + \dots$ <p>и определить тип вклада р – АО, которые центрированы на атомах А и В, в образование π-химической связи.</p> <p>а. связывающий вклад; б. антисвязывающий вклад; в. Несвязывающий вклад.</p>	
5.	<p>Проанализировать структуру МО (ψ_1)</p> $\Psi_1 = \dots + c_{11}\phi_{s(A)} + c_{12}\phi_{px(B)} + \dots$ <p>и определить тип вклада s и р – АО, которые центрированы на атомах А и В, в образование химической связи.</p> <p>а. связывающий вклад; б. антисвязывающий вклад; в. несвязывающий вклад.</p>	
6.	<p>S АО центрированы на атомах А и В и образуют ... комбинацию.</p>  <p>Выбрать компоненты $c_{21}\phi_{s(A)}$ и $c_{22}\phi_{s(B)}$ МО контролирующей эту химическую связь:</p> $\Psi_2 = \dots c_{21}\phi_{s(A)} \dots c_{22}\phi_{s(B)} +$ <p>а. связывающую; б. антисвязывающую; в. несвязывающую. г. $- c_{21}\phi_{s(A)}$; д. $+ c_{21}\phi_{s(A)}$;</p>	

	<p>е. - $c_{22}\varphi_{S(B)}$; ж. + $c_{22}\varphi_{S(B)}$.</p>	
7.	<p>p_x и S АО центрированы на атомах А и В и образуют ... комбинацию</p>  <p>Выбрать компоненты $c_{21}\varphi_{p_x(A)}$ и $c_{22}\varphi_{p_x(B)}$ МО контролирующей эту химическую связь:</p> $\Psi_2 = \dots c_{21}\varphi_{p_x(A)} \dots c_{22}\varphi_{S(B)} +$ <p>а. связывающую; б. антисвязывающую; в. несвязывающую. г. -$c_{21}\varphi_{p_x(A)}$; д. + $c_{21}\varphi_{p_x(A)}$; е. - $c_{22}\varphi_{S(B)}$; ж. + $c_{22}\varphi_{S(B)}$.</p>	
8.	<p>p_z АО центрированы на атомах А и В и образуют ... π-комбинацию</p>  <p>Выбрать компоненты $c_{21}\varphi_{p_z(A)}$ и $c_{22}\varphi_{p_z(B)}$ МО контролирующей эту химическую связь:</p> $\Psi_2 = \dots c_{21}\varphi_{p_z(A)} \dots c_{22}\varphi_{p_z(B)} +$ <p>а. связывающую; б. антисвязывающую; в. несвязывающую. г. -$c_{21}\varphi_{p_z(A)}$; д. + $c_{21}\varphi_{p_z(A)}$; е. -$c_{22}\varphi_{p_z(B)}$; ж. +$c_{22}\varphi_{p_z(B)}$.</p>	
9.	<p>Энергия резонансного орбитального взаимодействия атомов А и В вычисляется по выражению:</p> <p>а. $E_{AB}^k = -\frac{1}{2} \gamma_{AB} \sum_{i=1}^{ACI} \sum_{\mu=1}^{n_A} \sum_{v=1}^{m_B} (C_{i\mu} C_{iv})^2$;</p> <p>б. $E_{AB}^J = 2 \sum_{i=1}^{B3MO} \sum_{\mu=1}^{n_A} \sum_{v=1}^{n_B} c_{i\mu} c_{iv} S_{\mu\nu} \beta_{\mu\nu}$;</p> <p>в. $E_{AB}^{E,N} = -(Q_A \times Z_B + Q_B Z_A) \gamma_{AB}$;</p> <p>г. $E_{AB}^{E,E} = Q_A \times Q_B \times \gamma_{AB}$;</p> <p>д. $E_{AB}^{N,N} = Z_A \times Z_B \times \gamma_{AB}$</p>	

12. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ

По курсу предполагается проведение промежуточной аттестации в виде модульного контроля, и экзамена. Экзамен сдают студенты с целью повышения рейтинга.

Распределение баллов, которые могут получить студенты в процессе изучения дисциплины

Организационно учебная работа студента	СРС			Всего
	Индивидуальная работа	Модульный контроль	Индивидуальная творческая работа	
Max 50 баллов	max 10 баллов	max 40 баллов		100 баллов

Шкала соответствия баллов национальной шкале

Оценка по шкале ECTS	Оценка по 100-балльной шкале	Оценка по государственной шкале (экзамен, дифференцированный зачет)	Оценка по государственной шкале (зачет)
A	90-100	5 (отлично)	зачтено
B	80-89	4 (хорошо)	зачтено
C	75-79	4 (хорошо)	зачтено
D	70-74	3 (удовлетворительно)	зачтено
E	60-69	3 (удовлетворительно)	зачтено
FX	35-59	2 (неудовлетворительно) с возможностью повторной сдачи	не зачтено
F	0-34	2 (неудовлетворительно) с возможностью повторной сдачи при условии обязательного набора дополнительных баллов	не зачтено

13. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Лекционные занятия проводятся в аудитории, оснащенной мультимедийной техникой и доской. Лабораторные занятия проводятся в компьютерном классе, оборудованном компьютерами с лицензионным программным обеспечением, доступом к сети Интернет, столами, доской. Дополнительное обеспечение: Wi-Fi доступ в корпусах университета, текстовые и электронные ресурсы Научной библиотеки университета

14. РЕКОМЕНДОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

№	Наименование	Кол-во экземпляров в библиотеке ДонНУ	Наличие электронной версии в ЭБС
	Основная		
1.	Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по хим.-технол. направлениям и специальностям / В.Г. Цирельсон. – Москва: БИНОМ. Лаб. знаний, 2010. – 495 с.	30	
2.	Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по специально-	2	

	сти ВПО 020101.65 "Химия" / А.И. Ермаков. – Москва: Юрайт, 2010. – 555 с.		
3.	Майер, И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул / И. Майер ; пер. с англ. М.Б. Дарховского и А.М. Токмачева ; под ред. А.Л. Чугреева. – Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. – 384 с.	1	+
4.	Туровский Н.А. Практикум компьютерной структурной химии: учебное пособие /Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с	10	+
5.	Туровский Н.А. Практикум компьютерной структурной химии[Электронный ресурс]: учебное пособие /Н.А.Туровский. – Донецк: ГОУ ВПО «ДонНУ», 2018. – 145 с	Электронный ресурс	+
Дополнительная			
6.	Стрижак, П.Є. Квантова хімія: підруч. для студ. вищ. навч. закл. / П.Є. Стрижак; Національний ун-т "Києво-Могилянська акад.". – Київ: Вид. дім "Києво-Могилянська акад.", 2009. – 458 с. / Стрижак, П.Е. Квантовая химия: учебник для студ. выс. учебн. завед. / П.Е. Стрижак; Национальный ун-т "Києво-Могилянська акад.". – Киев: Изд. дом "Києво-Могилянська акад.", 2009. – 458 с.	2	+
7.	Гришаева Т. Н. Квантовая химия супрамолекулярных систем на основе кукурбит[<i>n</i>]урилов [Текст] / Т. Н.Гришаева, А.Н. Масой, А.М. Кузнецов. –Москва: <u>Ленанд</u> , 2016. – 208 с.	Электронный ресурс	+
8.	Пастернак, О. М. Основи квантової хімії : навч. посіб. / О. М. Пастернак, М. А. Туровський; Донецький нац. ун-т, хім. ф-т, каф. фіз. хімії. – Донецьк : ДонНУ, 2012. – 81 с. Пастернак, Е. Н. Основы квантовой химии: учебное пособие. / Е.Н. Пастернак, Н.А. Туровский ; Донецкий нац. ун-т, хим. ф-т, каф. физ. химии. – Донецк: ДонНУ, 2012. – 81 с.	10	

15. ИНФОРМАЦИОННЫЕ РЕСУРСЫ

<http://mondnr.ru/> – Министерство образования и науки Донецкой Народной Республики
<http://resobrnadzor.ru/> – Республиканская служба по контролю и надзору в сфере образования и науки

16. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

1. Windows 7 PRO(корпоративная лицензия ДОННУ, лицензия №46484614);
2. WindowsOffice (корпоративная лицензия ДОННУ, лицензия №46472919);
3. MicrosoftVisualStudio (лицензия программы DreamSpark для высших учебных заведений);
4. Лицензия GPL, Arach, BSD для свободного программного обеспечения:
 - Антивирус Касперского;
 - Adobe Acrobat Reader.

Рабочая программа рассмотрена и переутверждена на заседании кафедры физической химии с изменениями (без изменений) на _____ год.

Протокол № от « » _____ г.

Заведующий кафедрой _____

В.М. Михальчук