

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И.
Лобачевского»

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО

решением Ученого совета ННГУ

протокол от

31 августа 2021 г. № 11

Рабочая программа дисциплины
Квантовая химия органических соединений

Направление подготовки
04.06.01 «Химические науки»

Направленность подготовки
02.00.03 «Органическая химия»

Квалификация выпускника
Исследователь. Преподаватель-исследователь

Форма обучения
очная

Нижний Новгород
2021

1. Место дисциплины (модуля) в структуре основной образовательной программы (ООП)

Дисциплина «Квантовая химия органических соединений» относится к числу профессиональных дисциплин, является дисциплиной выбора и изучается на 2 году обучения, в 4 семестре.

Цель курса: дать слушателям знания по теоретическим основам современной квантовой химии в рамках подготовки к сдаче кандидатского экзамена по специальности 02.00.03 – органическая химия.

Задачи курса:

1. Изучить основные принципы квантовой химии.
2. Овладеть математическим аппаратом современной квантовой химии.
3. Овладеть терминологией квантовой химии.
4. Ознакомить с методологией применения квантовой химии в химических исследованиях.
5. Ознакомить с современными методами моделирования поверхностей потенциальной энергии молекул в основном и возбужденном состояниях органических молекул.
6. Сформировать представления о наиболее перспективных областях использования методов квантовой химии при изучении механизмов фотохимических реакций органических соединений.

Для успешного усвоения дисциплины аспирант должен знать основные теоретические положения следующих дисциплин:

- "Органическая химия" (теоретические представления органической химии, знания о составе, строении и свойствах основных классов органических соединений, владение основами органического синтеза);
- "Квантовая химия" (теоретические основы, терминология, математический аппарат квантовой химии).

В результате освоения дисциплины аспирант должен овладеть следующими навыками и умениями:

- знание основных принципов квантовой химии;
- владение терминологией и математическим аппаратом современной квантовой химии;
- умение изучать механизмы фотохимических реакций органических соединений с точки зрения представлений о наиболее перспективных областях использования методов квантовой химии при изучении механизмов.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения ООП (компетенциями выпускников)

Таблица 1

Планируемые результаты обучения по дисциплине

Код формируемой компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), характеризующие этапы формирования компетенций
ПК-2 базовый	З1 Знать: современное состояние науки в области органической химии и в смежных областях. З2 Знать: современное состояние науки в области органической химии и в смежных областях. У1 Уметь: представлять научные результаты по теме диссертационной работы в виде публикаций в рецензируемых научных изданиях. У2 Уметь: представлять результаты НИР (в т.ч., диссертационной

	работы) академическому и бизнес-сообществу. <i>В1 Владеть:</i> методами планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных данных, формулировки выводов и рекомендаций по направленности (научной специальности).
--	--

3. Структура и содержание дисциплины

Объем дисциплины составляет 2 зачетные единицы, всего 72 часа (18 часов лекции, 54 часа самостоятельная работа обучающегося).

Таблица 2

Структура дисциплины

Наименование раздела дисциплины	Всего, часов	В том числе					
		Контактная работа, часов					Самостоятельная работа обучающегося, часов
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Занятия лабораторного типа	Консультации	Всего	
Многоэлектронная проблема в квантовой химии	4	4	-	-	-	4	12
Приближение МО ЛКАО	7	7	-	-	-	7	21
Применение квантовой химии для исследования механизмов фотохимических реакций	7	7	-	-	-	7	21
Аттестация по дисциплине: зачет							
Итого	72	36	-	-	-	36	54

Таблица 3

Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела	Форма проведения занятия	Форма текущего контроля*
1	Многоэлектронная проблема в квантовой химии	Многоэлектронный атом. Сложение моментов количества движения в многоэлектронных атомах. Атомные термы. Мультиплетные состояния. Волновая функция многоэлектронной системы. Квантово-механическая формулировка принципа	Лекции, самостоятельная работа обучающегося	Индивидуальные задания

		Паули. Вариационный принцип. Уравнения Хартри-Фока. Возбужденные состояния атома.		
2	Приближение МО ЛКАО	<p>Принцип Борна-Оппенгеймера. Молекулярные орбитали. Понятие об адиабатическом приближении. Поверхности потенциальной энергии – преимущества и недостатки теоретических моделей, использующих эту концепцию. Двухатомные молекулы. Классификация молекулярных орбиталей на основе молекулярных квантовых чисел. Связывающие, несвязывающие и разрыхляющие молекулярные орбитали. Молекулярные термы. Описание возбужденных состояний двухатомных молекул. Классификация Каша. Основные свойства возбужденных состояний ($\pi\pi^*$)-, ($\pi\sigma^*$)-, ($\sigma\sigma^*$)- и ($\sigma\pi^*$)- типа. Методологическое значение этой классификации. Методологическое значение понятия валентности для описания возбужденных состояний. Метод дельта-матриц Циммермана. Гибридизация и геометрическое строение молекул. Изменение гибридизации атомов в возбужденных состояниях молекул. Полуэмпирические методы расчетов с использованием уравнений Хартри-Фока-Руутаана. Проблема многоцентровых интегралов. Приближение нулевого дифференциального перекрывания. Простейший π-электронный метод Хюккеля. Применение теории групп для классификации возбужденных</p>	Лекции, самостоятельная работа обучающегося	Индивидуальные задания

		<p>состояний. Правила сохранения элементов симметрии в фотохимических реакциях. Правила корреляции. Оценка величин интегралов дипольных моментов перехода с использованием методов теории групп. Современные методы расчета органических молекул с учетом статической и динамической корреляции электронов в молекулярных системах. Теорема Кона. Методы теории возмущений. Методы функционала матрицы плотности. Различные виды потенциалов. Особенности расчета возбужденных состояний органических молекул при помощи методов современной квантовой химии. Важность учета корреляции электронов. Применение методов с учетом взаимодействия конфигураций. Трудности, связанные с выбором размера активного пространства и способы их преодоления при расчете возбужденных состояний органических молекул. Квазиклассическое приближение в квантовой химии. Туннельный эффект. Теория туннельного переноса электрона, протона и атома водорода. Значение ее для современной фотохимии. Подбарьерные кинетические процессы. Работы акад. Гольданского. Нестационарная теория возмущений. Теория коэффициентов А и В Эйнштейна. Разложение возмущающего члена на дипольный, спин-орбитальный, квадрупольный и т.п. вклады.</p>		
3	Применение	Описание органических	Лекции,	Индивидуальные

	<p>квантовой химии для исследования механизмов фотохимических реакций</p>	<p>молекул при помощи квантовой химии. Понятие об электронной и спиновой плотности на атомах молекулы, порядках связей, индексах свободной энергии, потенциалах ионизации молекулярных систем.</p> <p>Применение квантовой химии в спектроскопии и фотохимии. Электронные спектры поглощения. Диаграмма Яблонского. Флуоресценция, фосфоресценция, перенос энергии электронного возбуждения.</p> <p>Расчет интегралов дипольного момента перехода между различными электронными состояниями органических молекул – основа для создания правил отбора в фотофизических и фотохимических процессах.</p> <p>Индексы реакционной способности и особенности использования их для предсказания реакционной способности органических соединений в фотохимических реакциях.</p> <p>Метод фронтальных молекулярных орбиталей, как основа для изучения окислительно-восстановительных реакций органических соединений.</p> <p>Комплексы с переносом заряда и их роль в фотохимии.</p>	<p>самостоятельная работа обучающегося</p>	<p>задания</p>
--	---	---	--	----------------

** В рамках занятий семинарского типа, групповых или индивидуальных консультаций может осуществляться текущий контроль успеваемости*

4. Образовательные технологии Использование мультимедийных презентаций. Аспирантам предоставляется возможность копирования презентаций для выполнения самостоятельной работы, подготовки к итоговому контролю. Дисциплина имеет электронную версию для презентации.

Самостоятельная работа. Умение работать с учебной и научной литературой; производить расчеты; пользоваться химическим языком. Развитие самостоятельности, интеллектуальных умений, умение анализировать явления и делать выводы.

5. Формы организации и контроля самостоятельной работы обучающихся Целью самостоятельной работы является овладение навыками работы с литературой (в читальном зале библиотеки, с доступом к ресурсам Интернет), более углубленное изучение отдельных разделов дисциплины при выполнении индивидуальных заданий. Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций.

Текущий контроль успеваемости осуществляется в форме индивидуальных заданий, как контроля самостоятельной работы.

Итоговый контроль по данному курсу проводится в виде зачета на знание материала по контрольным вопросам.

Типовые вопросы для зачета:

Тема 1.

1. Движение в потенциальном поле. Квантово-механическая модель атома водорода.
2. Квантовые числа и их связь со свойствами атомных орбиталей.
3. Атомные орбитали: форма и свойства s-, p-, d-орбиталей.
4. Многоэлектронный атом. Метод самосогласованного поля - как основа квантово-механического описания многоэлектронного атома.
5. Сложение моментов количества движения в многоэлектронных атомах.
6. Атомные термы. Мультиплетность состояния.
7. Волновая функция многоэлектронной системы. Квантово-механическая формулировка принципа Паули.
8. Бозоны и Фермионы.
9. Понятие о спин-орбиталях.
10. Вариационный принцип как основа для решения задач квантовой химии.
11. Метод Хартри-Фока.
12. Физический смысл кулоновского и обменного интегралов в выражении для полной энергии в методе Хартри-Фока.
13. Возбужденные состояния в многоэлектронных атомах.
14. Электронные термы. Их значение для описания фотохимических реакций.
15. Теорема Купманса и ее значение для описания фотохимических реакций.

Тема 2.

16. Принцип Борна-Оппенгеймера.
17. Адиабатическое приближение. Метод поверхностей потенциальной энергии: его преимущества и недостатки при описании фотохимических реакций.
18. Понятие о координате фотохимической реакции.
19. Молекулярные орбитали двухатомных молекул.
20. Понятие о связывающих и разрыхляющих молекулярных орбиталях.
21. Сравнение σ -, π -, и δ -молекулярных орбиталей.
22. Описание возбужденных состояний двухатомных молекул. Классификация Каша.
23. Показать графически схематическое изображение волновых функций π , π^* , σ , σ^* , n-МО.
24. Изобразить при помощи энергетических диаграмм возбужденные состояния ($\pi\pi^*$), ($\sigma\sigma^*$), ($\pi\pi^*$, $n\sigma^*$) и донорно-акцепторного типа. Предсказать изменение фотохимических свойств при переходе от одного возбужденного состояния к другому.
25. Приближение МО ЛКАО. Физическое и математическое истолкование.
26. Методологическое значение понятия «валентности» в фотохимии. Изменение валентности атомов при возбуждении.
27. Валентность и порядки связей, исходящих из данного атома. В чем сущность метода Циммермана.
28. Вариационный принцип в приближении МО ЛКАО.

29. Понятие о молекулярных термах.
30. Напишите молекулярные термы молекулы кислорода в триплетном и синглетном состояниях.
31. Методологическое значение молекулярных термов для исследования фотохимических реакций.
32. Уравнение Хартри-Фока-Руутаана. Неэмпирические и полуэмпирические расчеты.
33. Недостатки приближения Хартри-Фока. Понятие об электронной корреляции.
34. Метод полного пренебрежения дифференциальным перекрытием.
35. Величины, характеризующие распределение электронной плотности: заряды атомов и порядки связей.
36. Простейший π -электронный метод Хюккеля.
37. Описание возбужденных состояний π -электронных

Тема 3.

38. Описание органических молекул при помощи квантовой химии.
39. Анализ заселенностей по Малликену и его недостатки.
40. Метод поверхностей потенциальной энергии с точки зрения квантовой химии.
41. Приближение изолированной молекулы и индексы реакционной способности.
42. Теория граничных орбиталей для описания химических реакций.
43. Приближение изолированной молекулы.
44. Метод энергии локализации.
45. Понятие о возбужденном состоянии.
46. Метод диаграмм Яблонского.
47. Квантовая химия как методологическая основа фотохимии и спектроскопии.

6. Фонд оценочных средств для аттестации по дисциплине

6.1. Перечень компетенций выпускников образовательной программы с указанием результатов обучения (знаний, умений, владений), характеризующих этапы их формирования

Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования приведен в приложении 1.

6.2. Критерии и процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине. Описание шкал оценивания

Критерии оценок

Зачтено	Аспирант ответил на не менее 60% вопросов по основным разделам курса
Незачтено	Аспирант при ответах на вопросы проявил незнание важнейших разделов дисциплин (более 40%)

6.3. Примеры типовых контрольных заданий или иных материалов, необходимых для оценки результатов обучения, характеризующих сформированность компетенций.

Задания по разделам	Формируемая компетенция
	ПК2
Многоэлектронная проблема в квантовой химии	
Приближение МО ЛКАО	+
Применение квантовой химии для исследования механизмов фотохимических реакций	+

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

а) основная литература:

1. Смит, В.А. Основы современного органического синтеза [Электронный ресурс] : учебное пособие / В. А. Смит, А. Д. Дильман.—М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. — 753 с.
<http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=541053#none>
2. Смит, В. А. Основы современного органического синтеза [Электронный ресурс] : учебное пособие / В. А. Смит, А. Д. Дильман М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. - 750 с.
<http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=365562>
3. Травень, В. Ф. Органическая химия [Электронный ресурс] : учебное пособие для вузов : в 3 т. Т. III / М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013. - 388 с.
<http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=500800>

б) дополнительная литература:

1. Практикум по органической химии [Электронный ресурс] / В. И. Теренин [и др.] ; под ред. академика РАН Н. С. Зефирова. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. - 568 с.:
<http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=477523#none>
2. Задачи по органической химии с решениями [Электронный ресурс] / А. Л. Курц [и др.]. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011. - 350 с.
<http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=365366#none>
3. Титце, Л. Domino-реакции в органическом синтезе [Электронный ресурс] / Л. Титце, Г. Браше, К. Герике М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. — 674 с.
<http://znanium.com/catalog.php?bookinfo=541241#none>

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

<http://www.sciencedirect.com>

<http://pubs.acs.org/>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

- помещения для проведения занятий: лекционного типа, семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для хранения и профилактического обслуживания оборудования и помещения для самостоятельной работы обучающихся, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ННГУ;
- материально-техническое обеспечение, необходимое для реализации дисциплины, включая лабораторное оборудование;
- лицензионное программное обеспечение: *Windows, Microsoft Office*

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки» (уровень подготовки кадров высшей квалификации).

Автор

д.х.н., профессор _____ Зеленцов С.В.

Рецензент

д.х.н., профессор _____ Зайцев С.Д.

Заведующий кафедрой органической химии

химического факультета ННГУ им. Н.И. Лобачевского _____ Федоров А.Ю.

Программа рекомендована на заседании кафедры органической химии от «___»
_____ 2021 г. протокол № ____.

Программа одобрена на заседании Методической комиссии химического факультета от 27
августа 2021, протокол № 1.

Карты компетенций, в формировании которой участвует дисциплина

ПК-2

Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения				
	1	2	3	4	5
ЗНАТЬ: современное состояние науки в области органической химии и в смежных областях	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о современном состоянии науки в области органической химии	Неполные представления о современном состоянии науки в области органической химии	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы, представления о современном состоянии науки в органической химии	Сформированные систематические представления о современном состоянии науки в области органической химии
ЗНАТЬ: требования к содержанию и правила оформления рукописей к публикации в рецензируемых научных изданиях	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о требованиях к содержанию и правилам оформления рукописей к публикации в рецензируемых научных изданиях	Общие представления о требованиях к содержанию и правилам оформления рукописей к публикации в рецензируемых научных изданиях	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления о требованиях к содержанию и правилам оформления рукописей, наличие однократного опыта публикаций в рецензируемых научных изданиях	Сформированные представления о требованиях к содержанию и правилам оформления рукописей, наличие неоднократного опыта публикаций в рецензируемых научных изданиях
УМЕТЬ: представлять научные результаты по теме диссертационной работы в виде публикаций в рецензируемых научных	Отсутствие умений	Фрагментарное использование методов подготовки научных результатов к публикации в рецензируемых научных изданиях	В целом успешное, но не систематическое использование методов подготовки научных результатов к публикации в рецензируемых научных изданиях	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы использование методов подготовки научных результатов к публикации в рецензируемых научных	Сформированное умение использовать методов подготовки научных результатов к публикации в рецензируемых научных изданиях

изданиях				изданиях	
<p>УМЕТЬ:</p> <p>представлять результаты НИР (в т.ч., диссертационной работы) академическому и бизнес-сообществу</p>	Отсутствие умений	Умение представлять результаты НИР узкому кругу специалистов	В целом успешное, умение представлять результаты НИР (в т.ч., диссертационной работы) академическому сообществу	Успешное умение представлять результаты НИР (в т.ч., диссертационной работы) академическому и бизнес-сообществу	Сформированное умение представлять результаты НИР (в т.ч., диссертационной работы) академическому и бизнес-сообществу; определять целевые группы и форматы продвижения результатов собственной научной деятельности
<p>ВЛАДЕТЬ:</p> <p>методами планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных данных, формулировки выводов и рекомендаций по направленности (научной специальности)</p>	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение методов планирования, подготовки и проведения НИР, анализа и обсуждения полученных данных	В целом успешное, но не систематическое применение методов планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных данных	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение методов планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных данных, формулировка выводов по результатам НИР	Успешное и систематическое применение методов планирования, подготовки и проведения НИР и анализа и обсуждения экспериментальных данных; формулировка выводов и рекомендаций по результатам НИР