

ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

## ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

## Кафедра физической химии

**УТВЕРЖДАЮ:**

## Проектор по научно-методической и учебной работе

Е.И. Скафа

2017 г.

## Рабочая программа учебной дисциплины

## «КВАНТОВАЯ ХИМИЯ»

Направления подготовки: 04.04.01 Химия

## Магистерская программа: химия

## Программа подготовки: академическая магистратура

Квалификация: магистр

Форма обучения: очная

Донецк 2017

**УТВЕРЖДАЮ:**

Декан химического факультета

А.В. Белый



2017 г.

Программа составлена с учетом Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 23 сентября 2015 г. № 1042.

Программа учебной дисциплины «Квантовая химия» составлена на основе ГОС ВПО по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утвержденного приказом Министерства образования и науки ДНР от «20» апреля 2016 г. № 459, зарегистрированного в Министерстве юстиции ДНР от 17 мая 2016 г. № 1277, «Положения об организации учебного процесса в образовательных организациях высшего профессионального образования Донецкой Народной Республики», утвержденного приказом Министерства образования и науки ДНР 07 августа 2015 г. № 380 (с изменениями и дополнениями от 30 октября 2015 г. № 750), учебного плана по направлению подготовки 04.04.01 Химия (Магистерская программа: Химия), утвержденного Ученым Советом Университета от 31.03.2017 г., протокол № 3 и основной образовательной программы, утвержденной приказом ректора (№ 77/05 от 06.05 2017 г.).

Разработчик:

Кандидат химических наук,  
доцент кафедры физической  
химии

Н.А. Туровский

Программа учебной дисциплины утверждена на заседании кафедры физической химии.

Протокол № 17 от «08» июня 2017 г.

Заведующий кафедрой

В.М. Михальчук

Программа учебной дисциплины одобрена учебно-методической комиссией химического факультета

Протокол № 8 от «14» июня 2017 г.

Председатель учебно-методической  
комиссии химического факультета

Н.В. Яблочкова

## 1. Область применения и место дисциплины в учебном процессе:

Учебная дисциплина «Квантовая химия» относится к циклу вариативной части профессионального блока дисциплин (ПБ.ВС.3) подготовки студентов по направлению подготовки **04.04.01 Химия**. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими и сопутствующими дисциплинами: неорганическая, органическая, физическая химия. Дисциплина «Квантовая химия»:

- реализуется на химическом факультете ДонНУ кафедрой физической химии;
- основывается на базе дисциплин государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования по направлению подготовки «Магистр»;
- является основой для прохождения научной практики и выполнения выпускной работы магистра.

## 2. Структура дисциплины

Характеристика учебной дисциплины		
Направление подготовки	44.04.01 Химия	
Магистерская программа	химия	
Программа подготовки	академическая магистратура	
Квалификация	магистр	
Количество содержательных модулей	1	
Дисциплина базовой / вариативной части образовательной программы	дисциплина вариативной части	
Формы контроля	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	13	
- практических	13	
- лабораторных		
- самостоятельной работы	82	
в т.ч. индивидуальное задание		
Недельное количество часов,	9	
в т.ч. аудиторных	2	

## 3. Описание дисциплины

### Цели и задачи

**Цель изучения дисциплины** – получение студентами базовых сведений по квантовой химии, необходимых для освоения специальных дисциплин, а по окончании обучения в вузе – для грамотной, эффективной работы в сфере профессиональной деятельности. Последовательное освоение студентами основ теории и расчетных методов квантовой химии. **Основная цель дисциплины** “Квантовая химия” - дать в руки химикам - экспериментаторам инструмент исследования, который разрешил бы проводить квантово-химические исследования с использованием всех возможностей современных компьютерных технологий и научить их мыслить структурными категориями в химии.

**Целью самостоятельной работы студентов** является овладение фундаментальными знаниями, профессиональными умениями и навыками деятельности по профилю, опытом творческой, исследовательской деятельности.

Для организации СРС необходимы следующие условия:

- готовность студентов к самостоятельному труду;
- мотив к получению знаний;
- наличие и доступность всего необходимого учебно-методического и справочного материала как печатного, так и электронного, методических рекомендаций по выполнению СРС,
- доступа в сеть Интернет;
- система регулярного контроля качества выполненной самостоятельной работы;
- консультационная помощь, в том числе взаимодействие в сети Интернет.

Технология организации самостоятельной работы студентов включает использование информационных и материально-технических ресурсов образовательного учреждения.

В частности, материально-техническое и информационно-техническое обеспечение самостоятельной работы студентов включает в себя:

- библиотеку с читальным залом, укомплектованную в соответствии с существующими нормами;
- компьютерные классы с возможностью работы в INTERNET;
- учебную и учебно-методическую литературу, разработанную с учетом увеличения доли самостоятельной работы студентов, и иные материалы.

Формы самостоятельной работы студентов определяются содержанием учебной дисциплины, степенью подготовленности студентов. Эта работа включает в себя:

- самостоятельное изучение литературных источников;
- решение типовых задач;
- подготовку к промежуточному контролю и к итоговой зачетной работе;
- подготовку к зачету.

Выход на новый более качественный уровень высоких технологий XXI в тесно взаимосвязан с совершенствованием подготовки молодых специалистов, главная цель которой состоит в том, чтобы повысить образовательный, интеллектуально-аналитический и научный потенциал студента как будущего высококвалифицированного специалиста отечественных производственных и научно-исследовательских структур.

На этом принципе строится методологический подход к освоению дисциплины «Квантовая химия», Организация учебного процесса регламентируется рабочим учебным планом по направлению подготовки и расписанием учебных занятий, которые разрабатываются факультетом на основе Государственного образовательного стандарта, примерных программ дисциплин, учебных планов по направлению подготовки.

Самостоятельная работа студентов является неотъемлемой частью учебного процесса в подготовке квалифицированных специалистов, способных самостоятельно и творчески решать стоящие перед ними задачи. Процесс самостоятельной работы студентов необходимо рассматривать как единую комплексно-структурную систему. Студенты, теоретически и практически самостоятельно качественно освоившие заданную систему знаний и умений, переходят с уровня экстенсивно-спонтанных методов развития своих научно-аналитических знаний и умений на интенсивную методологию формирования научного мышления.

Самостоятельная работа студентов слагается из следующих элементов: изучение материала по учебникам, лекциям и учебным пособиям, сдача зачета по всему курсу. Ее основное назначение заключается в закреплении полученных теоретических знаний и практических умений студентов; углублении и расширении теоретических знаний; формировании умений использовать нормативную, справочную и специальную литературу;

развития познавательных способностей и активности студентов: творческой инициативы, самостоятельности, ответственности и организованности; формирования самостоятельности мышления, способностей к саморазвитию, самосовершенствованию и самореализации; формирования практических (общеучебных и профессиональных) умений и навыков; развития исследовательских умений; выработка навыков эффективной самостоятельной профессиональной (практической и научно-теоретической) деятельности на уровне мировых стандартов.

При осуществлении самостоятельной работы студентом необходимо учитывать, что процесс состоит из аудиторной и внеаудиторной работы.

Аудиторная самостоятельная работа по дисциплине выполняется на учебных занятиях под непосредственным руководством преподавателя и по его заданию.

Внеаудиторная самостоятельная работа - планируемая учебная, учебно-исследовательская, научно-исследовательская работа студентов, выполняемая во внеаудиторное время по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия

**Основная цель самостоятельной работы** – создание творческой системы по формированию компетенций, дающих возможность проводить решение задач по строению молекулярных систем и интерпретировать полученные экспериментальные данные с точки зрения квантово-химического описания объектов.

. **Задача** дисциплины - сформировать базовые представления о теоретических методах, которыми изучают электронное строение атомов и молекул; для получения информации о строении и реакционной способности молекул научить студентов использовать методы квантовой химии, квантовохимическую терминологию; рассмотреть современные комплексы программ для проведения квантово-химических расчетов.

**Главной задачей самостоятельной работы** является самоорганизация процесса обучения со стороны студентов, позволяющая эффективно прорабатывать теоретический материал, качественно готовиться к практическим занятиям с тем, чтобы сформировать компетенции, которые дадут возможность будущим выпускникам на высоком уровне применять в профессиональной деятельности полученные знания, умения и навыки.

Процесс самостоятельной работы способствует формированию таких социально-личностных компетенций, как настойчивость в достижении цели; способность перерабатывать большие объемы информации и выделять главное; развитая устная и письменная коммуникации; умение критически переосмысливать свой социальный опыт.

Одновременно развиваются общенаучные и инструментальные компетенции: способность использовать в познавательной деятельности базовые знания в области математики и естественных наук; способность в условиях развития науки и техники к критической переоценке накопленного опыта и творческому анализу своих возможностей; понимание необходимости приобретения новых знаний и способность приобретать их, используя современные научные методы, а также владение ими на уровне, позволяющем решать задачи в области химии и химической технологии; способность использовать навыки работы с информацией из различных источников для решения профессиональных задач; навыки аргументации, коммуникации и передачи научного материала; умение работать с компьютером на уровне пользователя; способность использовать в профессиональной деятельности базовые знания в области информатики и современных информационных технологий, навыки использования программных средств и работы в компьютерных сетях, умение использовать ресурсы Интернета

**Требования к уровню освоения содержания дисциплины:** процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ГОС ВПО по данному направлению подготовки (специальности):

**а) Общекультурные компетенции:**

– готовность действовать в нестандартных ситуациях, нести социальную и этическую ответственность за принятые решения (ОК-2).

**б) Общепрофессиональные компетенции:**

– способность использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач (ОПК-1);

– владение современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации (ОПК-2);

– способность реализовать нормы техники безопасности в лабораторных и технологических условиях (ОПК-3);

– готовность к коммуникации в устной и письменной формах на государственном языке и иностранном языке для решения задач профессиональной деятельности (ОПК-4).

**в) Профессиональные компетенции**

– способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты (ПК-1);

– владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии (ПК-2);

– готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований (ПК-3);

– способность участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати) (ПК-4).

**В результате изучения учебной дисциплины студент должен:**

**знать:**

- основные положения квантовой теории;
- модельные квантовомеханические задачи;
- 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 просторные 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.

Специалист – 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.

#### 4. Содержание дисциплины и формы организации учебного процесса

Порядковый номер и наименование темы	Краткое содержание темы
<b>Содержательный модуль 1</b>	
<p><i>Тема 1.</i>  <i>Концептуальные основы, состояние и становление квантовой химии.</i></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 Броиля. Волновой постулат де Броиля 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><i>Тема 2.</i>  <i>Квантово-химические модели атомно-молекулярных химических частиц</i></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 Слэттера. 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: <math>n</math>, <math>l</math>, <math>m</math>, <math>s</math>. Основные положения метода молекулярных орбиталей. Молекулярная орбиталь, ее</p>

	<p>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 состояния которого описывает МО. Методология определения энергии МО и коэффициентов при базисных функциях МО, уравнения Рутана. Вековое (секулярное) уравнение.</p>
<p><i>Тема 3.</i> <i>Неэмпирическая, DFT- и полуэмпирическая квантовая химия.</i></p>	<p>Неэмпирическая квантовая химия. NDDO полузэмпирическая квантовая химия: AM1, RM1, PM3, PM6, PDDG приближения. DFT-квантовая химия. Орбитали Хартри — Фока. Орбитали Слейтера - Зенера. Базисные функции для неэмпирических расчетов. Орбитали гауссового 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).</p>
<p><i>Тема 4.</i> <i>Концептуальные основы, состояние и проблемы теории химической связи.</i></p>	<p>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 (<math>E_{AB}</math>) 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.</p>
<p><i>Тема 5.</i> <i>Методология квантово-химического моделирования химических реакций.</i></p>	<p>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.</p>
<p><i>Тема 6.</i> <i>Методология квантово-химического моделирования влияния растворителя на</i></p>	<p>PCM континуальные модели и супермолекулярное приближение квантово-химического моделирования влияния растворителя на реакционную способность химических реагентов. Континуальная модель поляризационного действия. . Моделирование сольватных оболочек</p>

реакционную способность химических реагентов	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. <i>Актуальные направления современной квантовой химии.</i>	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 тунNELьная микроскопия. Магнитно-силовая микроскопия. Электросиловая микроскопия. Ближнепольная оптическая спектроскопия.

### Тематический план

Названия содержательных модулей и тем	Содержательный модуль 1					
	Количество часов					
	Очная форма обучения					
	Всего	лекции	практические	лабораторные	самостоятельная работа	индивидуальная работа
Тема 1. <i>Концептуальные основы, состояние и становление квантовой химии.</i>	16	2	2		12	
Тема 2. <i>Квантово-химические модели атомно-молекулярных химических частиц</i>	16	2	2		12	
Тема 3. <i>Неэмпирическая, DFT- и полуэмпирическая квантовая химия.</i>	16	2	2		12	
Тема 4. <i>Концептуальные основы, состояние и проблемы теории химической связи.</i>	16	2	2		12	
Тема 5. <i>Методология квантово-химического моделирования химических реакций.</i>	16	2	2		12	
Тема 6. <i>Методология квантово-химического моделирования влияния растворителя на реакционную способность химических реагентов</i>	15	2	2		11	

<i>Тема 7. Актуальные направления современной квантовой химии.</i>	13	1	1		11	
<i>Итого по содержательному модулю 1</i>	<b>108</b>	<b>13</b>	<b>13</b>		<b>82</b>	

**5. Методические рекомендации для проведения лекционных, практических и лабораторных занятий.**

Лабораторные 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.	1
<b>ВСЕГО</b>		<b>13</b>

**ТЕМЫ ПРАКТИЧЕСКИХ 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 диссоциации химических соединений.	2
3.	Методология квантово - химического расчета пути реакции неизодесмических реакций.	2
4.	Методология квантово - химического расчета стандартной энталпии образования методом изодесмических реакций.	2
5.	Методология квантово - химического расчета прочности химической связи методом изодесмических реакций.	2
6.	Методология квантово - химического расчета в приближении COSMO модели сольватации реагентов химических реакций	2
7.	Методология QM/MM расчета объектов био- и нанохимии. .	1
<b>ВСЕГО</b>		<b>13</b>

**6. Методические рекомендации по организации самостоятельной работы студентов.**

**ОРГАНИЗАЦИЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ**

<b>№ п/п</b>	<b>Название темы</b>	<b>Количество часов</b>
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.	6
	Квантовая экологическая химия: концепции, состояние и перспективы.	5
	<b>ВСЕГО</b>	<b>82</b>

**7. Индивидуальные задания содержатся в методических указаниях.**

**Индивидуальная работа**

**Цель:** овладеть теорией и практикой квантовой химии.

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

N	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	C <sub>1%</sub>	HCR	E <sub>pc</sub>
1	H	H	30	80	-0.88
2	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	-	-	-0.97
3	F	H	15	100	-0.75
4	CF <sub>3</sub>	H	7	75	-0.65
5	CF <sub>3</sub> 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<sub>1%</sub> – 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 вольтметрии в диметилформамиде.

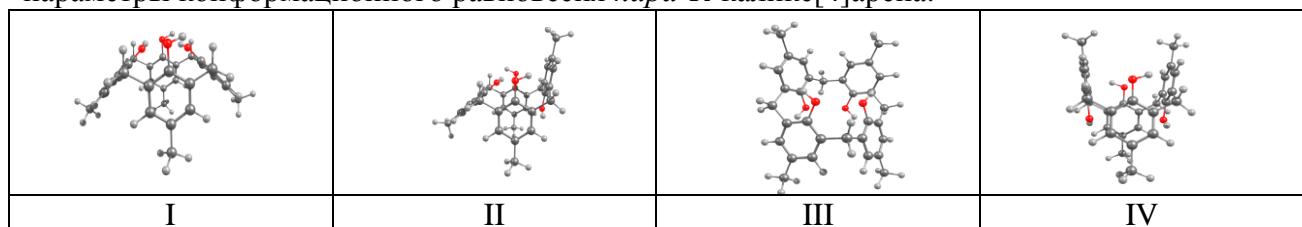
Постройте графики зависимости свойств исследуемого ряда соединений в координатах.

Серия 1	Серия 2	Серия 3
1. $C_{1\%} = f(\Delta H_f^\circ)$ ,	1. $HCR = f(\Delta H_f^\circ)$ ,	1. $E_{pc} = f(\Delta H_f^\circ)$ ,
2. $C_{1\%} = f(E_{B3MO})$ ,	2. $HCR = f(E_{B3MO})$ ,	2. $E_{pc} = f(E_{B3MO})$ ,
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 энталпии 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 ( $\mathbf{R}_1\mathbf{OOR}_2$ ) и оксирадикалов ( $\mathbf{RO}^\bullet$ ), которые образуются в результате гомолитического разрыва  $\text{O}-\text{O}$ -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 <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	вариант	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>
1.	CH <sub>3</sub>	H	11.	CH <sub>3</sub>	H
2.	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	H	12.	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	H
3.	Ph	H	13.	Ph	H
4.	цикло-C <sub>6</sub> H <sub>11</sub>	H	14.	цикло-C <sub>6</sub> H <sub>11</sub>	H
5.	C <sub>11</sub> H <sub>23</sub>	H	15.	C <sub>11</sub> H <sub>23</sub>	H
6.	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	16.	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>
7.	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>3</sub>	17.	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>3</sub>
8.	Ph	CH <sub>3</sub>	18.	Ph	CH <sub>3</sub>
9.	цикло-C <sub>6</sub> H <sub>11</sub>	CH <sub>3</sub>	19.	цикло-C <sub>6</sub> H <sub>11</sub>	CH <sub>3</sub>
10.	C <sub>11</sub> H <sub>23</sub>	CH <sub>3</sub>	20.	C <sub>11</sub> H <sub>23</sub>	CH <sub>3</sub>

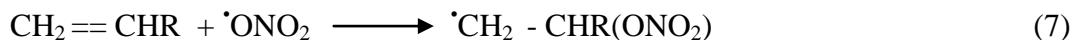
5. Провести квантово-химическое исследование влияния природы растворителя в приближении континуальной модели COSMO на электронные и термодинамические параметры пероксилных соединений, которые приведены в индивидуальной работе 4.

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<sup>·</sup>) и гидропероксильные (HO<sub>2</sub><sup>·</sup>) радикалы, которые, реагируя с углеводородами RH и O<sub>2</sub>, быстро могут превращаться в пероксирадикалы RO<sub>2</sub><sup>·</sup>.

Провести методом РМ3 квантовохимический расчет реагентов 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 298 К. Рассчитать ΔG реакций (1-7) при 298 К. R = R<sub>1</sub> 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 модульного контроля (ОБРАЗЕЦ ВАРИАНТА 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 (МКР)**  
**ВАРИАНТ № 1**

**Задание 1.**

. Концептуальные основы метода молекулярных орбиталей

1. Методология НХФ (UHF) приближения квантовой химии.
2. Методология полуэмпирической квантовой химии.
3. Концептуальные основы, состояние и проблемы теории химической связи
4. Квантовая биохимия.

**ПРАКТИКО-ОРИЕНТИРОВАННЫЕ ЗАДАНИЯ**  
**(каждое задание оценивается 5 баллами)**

**Задание 2.** Описать методологию определения прочности О-Н связи ( $BDE_{O-H}$ ) молекулы метанола. Для получения необходимой информации использовать Hyperchem комплекс программ компьютерной структурной химии.

**Задание 3.** Описать методологию определения орбитального потенциала ионизации в соответствии теоремы Купманса молекулы метанола. Для получения необходимой информации использовать Hyperchem комплекс программ компьютерной структурной химии.

**Задание 4.** Описать методологию определения энергии дезактивации синглетного возбужденного электронного состояния ( $S_1$ ) молекулы метанола путем фосфоресценции ( $T_1 \rightarrow S_0$ ). Для получения необходимой информации использовать Hyperchem комплекс программ компьютерной структурной химии.

Утверждено на заседании кафедры физической химии,  
протокол № \_\_\_\_ от \_\_\_\_ 20 \_\_\_\_ г.

Зав. кафедрой физической химии

Экзаменатор

### Критерии оценивания модульного контроля

Номер задания	Количество баллов
Задание 1	5
Задание 1	5
Задание 3	5
Задание 4	5
<b>Всего</b>	<b>20</b>

### 10. Образец экзаменационного билета (ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ВОПРОСЫ К ЭКЗАМЕНУ, ОБРАЗЕЦ БИЛЕТА И КРИТЕРИЙ 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 Броиля.
12. Принцип неопределенности 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. Трехмерный 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 средство 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 средство 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. Кванто-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

*Образец экзаменационного билета*

**ГОУ ВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**  
Химический факультет

- Направление подготовки:* 44.04.01 Химия  
*Магистерская программа:* химия  
*Программа подготовки:* академическая магистратура  
*Семестр* 2  
*Учебная дисциплина* Квантовая химия

**БИЛЕТ №1**

1. Методология квантово-химического определения энергии гомолитической диссоциации химических соединений.
2. Валентное приближение квантовой химии: валентные и невалентные электроны; ядерно-электронный остов.
3. Концепция Бора орбитальной модели атома: показать ограниченность силового постулата стационарности электронной орбиты.
4. Возбужденное синглетное электронное состояние химических частиц вещества и его спиновая мультиплетность.
5. Квантово-химическая теория химической связи: орбитально - электростатическая концепция и принцип соответствия атомных орбиталей; двухатомные взаимодействия в приближении орбитально-электростатической концепции; концепция Гельмана-Фейнмана о силах ядерно-электронных взаимодействий в молекулах.

Утверждено на заседании кафедры физической химии  
Протокол №\_\_\_\_ от „\_\_\_\_” 20\_\_\_\_ г.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_

Экзаменатор \_\_\_\_\_

***Критерии оценивания экзамена***

<b>Номер задания</b>	<b>Количество баллов</b>
Задание 1	10
Задание 2	10
Задание 3	10
Задание 4	10
Задание 5	10
<b>Всего</b>	<b>50 баллов</b>

## 11. Критерии оценивания

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

*Распределение баллов, которые могут получить студенты  
в процессе изучения дисциплины*

<b>Организационно учебная работа студента</b>	<b>СРС</b>		
	<b>Индивидуальная работа</b>	<b>Модульный контроль</b>	<b>Индивидуальная творческая работа</b>
max 30 баллов	max 30 баллов	max 40 баллов	max 30 баллов
			разработка реферата, подготовка доклада СРС

***Шкала соответствия баллов национальной шкале***

<b>Оценка по шкале ECTS</b>	<b>Оценка по 100-балльной шкале</b>	<b>Оценка по государственной шкале (экзамен, дифференцированный зачет)</b>	<b>Оценка по государственной шкале (зачет)</b>
A	90-100	5 (отлично)	зачтено

<b>B</b>	80-89	4 (хорошо)	зачтено
<b>C</b>	75-79	4 (хорошо)	зачтено
<b>D</b>	70-74	3 (удовлетворительно)	зачтено
<b>E</b>	60-69	3 (удовлетворительно)	зачтено
<b>FX</b>	35-59	2 (неудовлетворительно) с возможностью повторной сдачи	не зачтено
<b>F</b>	0-34	2 (неудовлетворительно) с возможностью повторной сдачи при условии обязательного набора дополнительных баллов	не зачтено

## 12. 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.

## 13. Рекомендованная литература

№	Литература	Кол-во экз.
<b>Основная</b>		
1	Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. 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 специальности ВПО 020101.65 "Химия" / А.И. Ермаков. – Москва: Юрайт, 2010. – 555 с.	2
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
<b>Дополнительная</b>		
1	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
2	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 "Киево-Могилянская акад.". – Киев: Изд. дом "Киево-Могилянская акад.", 2009. – 458 с.	2

## 15. Информационные ресурсы

<http://mondnriyu/> – Министерство образования и науки Донецкой Народной Республики

<http://resobrnadzor.ru/> – Республиканская служба по контролю и надзору в сфере образования и науки

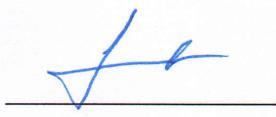
**16. Программное обеспечение.**

1. Windows 7 PRO (корпоративная лицензия ДонНУ лицензия №46484614);
2. Microsoft Office ((корпоративная лицензия ДонНУ лицензия №46472919);
3. MOPAC 2016 – комплекс программ структурной химии (программа доступа бесплатно для академического, некоммерческого использования. Академическая лицензия).
4. Microsoft Visual Studio (лицензия программы DreamSpark для высших учебных заведений);
5. Лицензия GPL, Apach, 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 2018/2019 год.

Протокол № 1 от “20” августа 2018 г.

Зав. кафедрой



Михальчук В.М.