



**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ  
ИРКУТСКИЙ ИНСТИТУТ ХИМИИ им. А.Е. ФАВОРСКОГО  
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК**

**УТВЕРЖДАЮ**

Директор, д.х.н.

А.В. Иванов



2018 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

**Основы квантово-химического моделирования строения молекул  
и реакционной способности веществ**

основная образовательная программа –  
программа подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре  
по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки,  
профиль Физическая химия

Квалификация: Исследователь.  
Преподаватель-исследователь.

Год набора: 2018 г., 2019 г., 2020 г.

Иркутск 2018

Рабочая программа составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации) (утвержден Приказом Министерства образования и науки РФ от 30.07.2014 № 869)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА РАССМОТРЕНА И ОДОБРЕНА на заседании Ученого совета ИрИХ СО РАН протокол № 7 от 30 мая 2018 г.

Начальник отдела аспирантуры к.х.н.



Н.Н. Трофимова

## 1. Цели и задачи учебной дисциплины

Рассматриваемая дисциплина относится к основным дисциплинам при подготовке аспирантов, обучающихся по профилю Физическая химия..

**Целью изучения дисциплины** является приобретение фундаментальных знаний и практических навыков, необходимых для профессиональной научно-исследовательской и образовательной деятельности в области квантовой химии и в смежных областях науки; формирование обобщающей теоретической базы для изучения строения и реакционной способности веществ методами квантовой химии.

### Задачи:

- формирование у обучающихся современных представлений о квантовой химии, ее роли и значимости в сопоставлении с другими химическими науками;
- освоение теоретических основ квантовой химии;
- формирование глубокого понимания общих закономерностей зависимости свойств соединений от их строения;
- освоение навыков применения методов моделирования электронного строения атомов и молекул для решения научных и прикладных задач химии;
- формирование представлений о квантово-химической теории реакционной способности соединений и получение навыков ее использования для решения научных и прикладных задач;
- освоение методов планирования эксперимента и обработки собственных исследований;
- обучение умению систематизировать и обобщать результаты собственных исследований в сопоставлении с известными литературными данными;
- обучение умению оформлять результаты собственных исследований в виде публикаций, отчетов, докладов;
- освоение методики преподавания химии.

## 2. Место дисциплины в структуре ООП

2.1. Учебная дисциплина Б1.В.ОД.2 «Основы квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности веществ» входит в вариативную часть междисциплинарного профессионального модуля ООП.

2.2. Данная программа строится на преемственности программ в системе высшего образования и предназначена для аспирантов ИрИХ СО РАН, прошедших обучение по программе магистров или специалистов, прослушавших соответствующие курсы и имеющих по ним положительные оценки. Она основывается на положениях, отраженных в учебных программах указанных уровней. Для освоения дисциплины «Основы квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности веществ» требуются знания и умения, приобретенные обучающимися в результате освоения ряда предшествующих дисциплин (разделов дисциплин), таких как:

- Квантовая химия;
- Физическая химия;
- Строение вещества;

- Физико-химические методы анализа;
- Органическая химия;
- Химия высокомолекулярных соединений;
- Неорганическая химия.

2.3. Дисциплина «Основы квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности веществ» необходима при подготовке к государственной итоговой аттестации.

### 3. Требования к результатам освоения дисциплины

Процесс изучения дисциплины «Основы квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности веществ» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ООП по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки, профиль Физическая химия:

#### ***Профессиональные компетенции***

- умение применять физико-химические методы исследования структуры вещества, знание основ квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности вещества (ПК-4).

По окончании изучения дисциплины аспиранты должны:

#### ***Знать:***

- типовые методы и современные методологии решения квантово-химических задач;
- методы изучения электронного строения атомов и молекул;
- основы квантово-химической теории реакционной способности соединений;
- механизмы базовых химических реакций в органической и элементоорганической химии, подходы и методы изучения механизмов;
- влияние строения на реакционную способность и физико-химические свойства органических соединений;
- физико-химические методы исследования строения органических соединений и реакций органической химии;
- современную периодическую литературу (журналы) и электронные базы данных по органической химии, методы поиска информации о свойствах и синтезе органических веществ;
- роль и место квантовой химии в системе фундаментальных химических наук.

#### ***Уметь:***

- оценивать и анализировать электронное строение атомов и молекул;
- осуществлять расчеты электронного строения атомов и молекул, интерпретировать полученные результаты;
- оценивать реакционную способность органических и элементоорганических соединений с помощью методов квантовой химии;
- осуществлять поиск литературных данных по теме исследования с использованием современных баз данных и поисковых систем.

#### ***Иметь опыт:***

- планирования и проведения эксперимента по теме научного исследования;
- применения квантово-химических расчетов электронного строения атомов и молекул;
- моделирования свойств веществ и параметров органических реакций с использованием квантово-химических методов;
- написания научных отчетов, статей, проектов.

### 4. Структура и содержание учебной дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетные единицы (144 часа).

#### 4.1. Структура дисциплины

| № | Наименование дисциплины                                                                      | Объем учебной работы, ч |                 |               |      |        |     |                | Вид итогового контроля |
|---|----------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------|-----------------|---------------|------|--------|-----|----------------|------------------------|
|   |                                                                                              | Всего                   | Всего аудиторн. | Из аудиторных |      |        |     | Самост. работа |                        |
|   |                                                                                              |                         |                 | Лекц.         | Лаб. | Практ. | КСР |                |                        |
| 1 | Основы квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности веществ | 144                     | 54              | 27            | -    | 27     | 36  | 54             | Диф.зачет              |

#### 4.2. Содержание дисциплины

##### 4.2.1. Разделы дисциплины и виды занятий

| №                   | Наименование разделов и тем                                                              | Виды учебной работы и трудоемкость, ч |           |          |           |           |           | Формы текущего контроля успеваемости  |
|---------------------|------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------|-----------|----------|-----------|-----------|-----------|---------------------------------------|
|                     |                                                                                          | Всего                                 | Лекц.     | Лаб      | Практ     | СР        | КСР       |                                       |
| 1                   | Основы современной теории химического строения.                                          | 24                                    | 5         | -        | 4         | 9         | 6         | Устный групповой опрос                |
| 2                   | Методы квантовой химии.                                                                  | 24                                    | 5         | -        | 4         | 9         | 6         | Устный групповой опрос                |
| 3                   | Межмолекулярное взаимодействие и его описание в квантовой химии.                         | 24                                    | 5         | -        | 4         | 9         | 6         | Устный групповой опрос                |
| 4                   | Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов.                        | 24                                    | 4         | -        | 5         | 9         | 6         | Устный групповой опрос, решение задач |
| 5                   | Анализ геометрического и электронного строения многоатомных молекул на основе метода МО. | 24                                    | 4         | -        | 5         | 9         | 6         | Устный групповой опрос                |
| 6                   | Теория реакционной способности органических соединений.                                  | 24                                    | 4         | -        | 5         | 9         | 6         | Устный групповой опрос                |
| <b>Всего часов:</b> |                                                                                          | <b>144</b>                            | <b>27</b> | <b>-</b> | <b>27</b> | <b>54</b> | <b>36</b> |                                       |

#### 4.2.2. Содержание разделов дисциплины

| № | Наименование раздела дисциплины                                                          | Содержание раздела (темы)                                                                                                                                                                                                                                                                                           | Формы проведения занятий                 |
|---|------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------|
| 1 | Основы современной теории химического строения.                                          | Уравнение Шредингера и способы его решения. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Поверхность потенциальной энергии. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). | Лекции, семинары, самостоятельная работа |
| 2 | Методы квантовой химии.                                                                  | Методы, использующие нулевое дифференциальное перекрытие. Методы <i>ab initio</i> . Методы на основе теории функционала плотности. Влияние базисного набора. Возможности и ограничения применения методов квантовой химии.                                                                                          | Лекции, семинары, самостоятельная работа |
| 3 | Межмолекулярное взаимодействие и его описание в квантовой химии.                         | Водородная связь. Ван-дер-Ваальсовы комплексы. Сольватация и энергия сольватации. Специфические и неспецифические взаимодействия. Модели Онзагера и PCM.                                                                                                                                                            | Лекции, семинары, самостоятельная работа |
| 4 | Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов.                        | Наиболее распространенные программные комплексы.                                                                                                                                                                                                                                                                    | Лекции, семинары, самостоятельная работа |
| 5 | Анализ геометрического и электронного строения многоатомных молекул на основе метода МО. | Оптимизация геометрии. Поправки на энергию нулевых колебаний. Расчет термодинамических параметров молекул. Расчет частот колебаний многоатомных молекул. Эффекты среды. ППЭ и стационарные точки на ней. Сканирование ППЭ.                                                                                          | Лекции, семинары, самостоятельная работа |
| 6 | Теория реакционной способности органических соединений.                                  | Прямая и обратная кинетические задачи. Индексы реакционной способности: индексы свободной валентности, заряды на атомах, индексы Фукуи, энергии катионной, анионной и радикальной локализации. Поиск структуры переходных состояний.                                                                                | Лекции, семинары, самостоятельная работа |

#### 5. Образовательные технологии

1. Активные образовательные технологии: лекции, семинары и практические работы.
2. Сопровождение лекций визуальными материалами в виде слайдов, подготовленных с использованием современных компьютерных технологий, проецируемых на экран с помощью видеопроектора.
3. Проведение практических работ в лабораториях, участие обучающихся в научной работе и выполнении исследовательских проектов.
4. Использование специального программного обеспечения и Интернет-ресурсов для обучения в ходе практических и самостоятельных работ.

## **6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов**

Виды самостоятельной работы:

в домашних условиях, в читальном зале библиотеки, на компьютерах с доступом к базам данных и ресурсам Интернет, в лабораториях с доступом к лабораторному оборудованию и приборам.

Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, учебное и научное программное обеспечение, ресурсы Интернет.

## **7. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины**

Цель контроля - получение информации о результатах обучения и степени их соответствия результатам обучения.

### **7.1. Текущий контроль**

Текущий контроль успеваемости, т.е. проверка усвоения учебного материала, регулярно осуществляемая на протяжении семестра. Текущий контроль знаний учащихся организован как устный групповой опрос (УГО).

Текущая самостоятельная работа аспиранта направлена на углубление и закрепление знаний, и развитие практических умений аспиранта.

### **7.2. Промежуточная аттестация**

Промежуточная аттестация осуществляется в конце семестра и завершает изучение дисциплины «Основы квантово-химического моделирования строения молекул и реакционной способности веществ». Форма аттестации – дифференцированный зачет.

### **Контрольные вопросы к зачету:**

Основы современной теории химического строения.

Уравнение Шредингера и способы его решения. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Поверхность потенциальной энергии. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО).

Методы квантовой химии.

Методы, использующие нулевое дифференциальное перекрывание. Методы *ab initio*. Методы на основе теории функционала плотности. Влияние базисного набора. Возможности и ограничения применения методов квантовой химии.

Межмолекулярное взаимодействие и его описание в квантовой химии.

Водородная связь. Вандерваальсовы комплексы. Сольватация и энергия сольватации. Специфические и неспецифические взаимодействия. Модели Онзагера и PCM.

Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов.

Наиболее распространенные программные комплексы (GAUSSIAN и др.).

Анализ геометрического и электронного строения многоатомных молекул.

Оптимизация геометрии. Поправки на энергию нулевых колебаний. Расчет термодинамических параметров молекул. Расчет частот колебаний многоатомных молекул. Эффекты среды. ППЭ и стационарные точки на ней. Сканирование ППЭ.

Теория реакционной способности органических соединений.

Прямая и обратная кинетические задачи. Индексы реакционной способности: индексы свободной валентности, заряды на атомах, индексы Фукуи, энергии катионной, анионной и радикальной локализации. Поиск структуры переходных состояний.

## 8. Учебно-методическое и информационное обеспечение учебной дисциплины

### Основная литература

1. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 1 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 567 с.
2. Трофимов, А. Б. Введение в квантовую химию: учеб. пособие. – Иркутск: Изд-во ИГУ. 2013. – 192 с.

### Дополнительная литература

1. Foresman, J. B. Exploring Chemistry With Electronic Structure Methods / J. B. Foresman, A. E. Frisch. – 2nd ed. – Pittsburgh: Gaussian Inc, 1996. – 304 с.
2. Афанасьев, Б. Н. Физическая химия / Б. Н. Афанасьев, Ю. П. Акулова. – М.: Лань, 2012. – 464 с.
3. Горшков, В. И. Основы физической химии / В. И. Горшков, И. А. Кузнецов. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 407 с.
4. Илиел, Э. Основы органической стереохимии / Э. Илиел. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 703 с.
5. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 2 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 623 с.
6. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 3 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 544 с.
7. Реутов, О. А. Органическая химия: В 4-х т. Т. 4 / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 726 с.
8. Сильверстейн, Р. Спектрометрическая идентификация органических соединений / Р. Сильверстейн, Ф. Вебстер, Д. Кимл. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 557 с.
9. Эльшенбройх, К. Металлоорганическая химия / К. Эльшенбройх. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 750 с.

### Электронные ресурсы

1. Байков, Ю.А. Квантовая механика [Электронный ресурс]: учебное пособие / Ю.А. Байков, В.М. Кузнецов. — Электрон. дан. — Москва: Издательство "Лаборатория знаний", 2015. — 294 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/70719>. — Загл. с экрана.
2. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия [Электронный ресурс]: / В.И. Барановский. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург: Лань, 2017. — 428 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/92941>. — Загл. с экрана.
3. Белашенко, Д.К. Компьютерные методы в физике и физической химии. Лабораторный практикум [Электронный ресурс]: учебное пособие / Д.К. Белашенко. — Электрон. дан. — Москва: МИСИС, 2012. — 109 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/47442>. — Загл. с экрана.
4. Бутырская, Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView [Электронный ресурс]: монография / Е.В. Бутырская. — Электрон. дан. — Москва: СОЛОН-Пресс, 2011. — 224 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/13803>. — Загл. с экрана.
5. Смирнов, В.П. Групповые методы в теории атомов, молекул и кристаллов [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.П. Смирнов. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург: НИУ ИТМО, 2013. — 106 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/43465>. — Загл. с экрана.
6. Соломоник, В.Г. Квантово-химические расчеты строения и колебательно-вращательных спектров двухатомных молекул [Электронный ресурс]: учебное пособие / В.Г. Соломоник. — Электрон. дан. — Иваново: ИГХТУ, 2008. — 80 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/4501>. — Загл. с экрана.

7. Хёльте, Х.-. Молекулярное моделирование: теория и практика [Электронный ресурс]: учебное пособие / Х.-. Хёльте, В. Зиппль, Д. Роньян, Г. Фолькерс. — Электрон. дан. — Москва: Издательство "Лаборатория знаний", 2015. — 322 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/66153>. — Загл. с экрана.
8. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс]: учебное пособие / В.Г. Цирельсон. — Электрон. дан. — Москва: Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 522 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94104>. — Загл. с экрана.

#### **Интернет-ресурсы**

- [Taylor & Francis](#) (журналы издательства)
- [American Chemical Society](#)
- [Thieme Chemistry](#)
- [Wiley Online Library](#)
- [Royal Society Chemistry](#)
- [Springer](#)
- [Sci Finder \(Chemical Abstracts Service\)](#)
- [Web of Science](#)
- [Реферативная база данных ГПНТБ СО РАН](#)
- [E-library](#)
- [ЭБС «Издательство «Лань»](#)

#### **9. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

Для освоения программы обучения и для выполнения научно-исследовательских работ по теме диссертации каждому аспиранту предоставлено индивидуальное рабочее место, оборудованное приточно-вытяжной вентиляцией, водопроводом, водоотведением, воздухопроводом. При выполнении квалификационных и диссертационных работ аспиранты имеют возможность использовать материально-технические средства лабораторий (оргтехника, реактивы, расходные материалы, лабораторная посуда, измерительное оборудование и др.), а также имеют доступ к дорогостоящему оборудованию ИрИХ и Байкальского центра коллективного пользования СО РАН (цифровой мультаядерный Фурье-спектрометр ЯМР DPX-400, ЯМР-спектрометр AV-400 фирмы Bruker Bio-Spin, хроматомасс-спектрометр GCMS-QP5050A фирмы SHIMADZU, импульсный ЭПР-спектрометр Bruker ELEXSYS E580, инфракрасный Фурье-спектрометр IFS-25 фирмы Bruker, ИК-КР Фурье спектрометры Varian и Vertex-70 фирмы Varian, UV/VIS-спектрометр Lamda 35 фирмы Perkin Elmer, спектрофлуориметр LS55, изготовитель Perkin Elmer, порошковый дифрактометр D2 PHASER, монокристаллический дифрактометр D8 VENTURE и др.) Для проведения квантово-химических расчетов имеется вычислительный кластер 39Гц/112Гб/14Тб и необходимое программное обеспечение.

**Сведения о переутверждении рабочей программы учебной дисциплины  
на очередной учебный год и регистрация изменений**

| Учебный год     | Решение Ученого совета<br>(№ протокола, дата<br>заседания) | Подпись<br>ответственного<br>(Ф.И.О., подпись) | Номер изменения<br>(или без изменений) |
|-----------------|------------------------------------------------------------|------------------------------------------------|----------------------------------------|
| 2019-2020 уч.г. | Протокол № 3<br>от 06.06.2019г.                            | Розеник О.М.<br><i>[подпись]</i>               | Без изменений                          |
| 2020-2021 уч.г. | Протокол № 6<br>от 27.03.2020г.                            | Розеник О.М.<br><i>[подпись]</i>               | Без изменений                          |
|                 |                                                            |                                                |                                        |
|                 |                                                            |                                                |                                        |
|                 |                                                            |                                                |                                        |
|                 |                                                            |                                                |                                        |
|                 |                                                            |                                                |                                        |
|                 |                                                            |                                                |                                        |

**Содержание изменений (вносится от руки):**