

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова
Факультет биологии и экологии

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по развитию образования
_____ Е.В.Сапир

" ____ " _____ 2012 г.

**Рабочая программа дисциплины
послевузовского профессионального образования
(аспирантура)
Основы квантово-химического моделирования и оценки реакционной
способности органических соединений
по специальности научных работников
02.00.03 Органическая химия**

Ярославль 2012

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Основы квантово-химического моделирования и оценки реакционной способности органических соединений» в соответствии с общими целями основной профессиональной образовательной программы послевузовского профессионального образования (аспирантура) (далее - образовательная программа послевузовского профессионального образования) являются:

- знание основных постулатах и математическом аппарате квантовой механики;
- представление о приближенных методах решения квантово-механических задач;
- представления об основных положениях квантовой химии;
- знание о неэмпирических и полуэмпирических методах изучения электронного строения атомов и молекул, применение получаемых данных для решения научных и прикладных задач органической химии;
- знание и применение теории реакционной способности органических соединений для решения научных и прикладных задач.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы послевузовского профессионального образования

Данная дисциплина относится к разделу обязательные дисциплины (подраздел дисциплины по выбору аспиранта ОД.А.05) образовательной составляющей образовательной программы послевузовского профессионального образования по специальности научных работников 02.00.03 Органическая химия.

Дисциплина «Основы квантово-химического моделирования и оценки реакционной способности органических соединений» показывает пути решения одной из основных проблем современной органической химии – установление характера и природы связи «структура-свойства».

Для изучения данной дисциплины необходимы «входные» знания, умения, полученные в процессе обучения по программам специалитета или бакалавриата – магистратуры, а также при изучении дисциплины «Современная органическая химия») в аспирантуре и готовность обучающегося, к восприятию знаний и навыков, необходимых при освоении данной дисциплины и приобретенных в результате освоения предшествующих дисциплин. Освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее для выполнения и защиты диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук.

3. Требования к результатам освоения содержания дисциплины «Основы квантово-химического моделирования и оценки реакционной способности органических соединений»

В результате освоения дисциплины «Основы квантово-химического моделирования и оценки реакционной способности органических соединений» обучающийся должен:

знать:

- методы решения квантово-химических задач;
- неэмпирические и полуэмпирические методы изучения электронного строения атомов и молекул.

уметь:

- оценивать и анализировать электронное строение атомов и молекул;
- осуществлять неэмпирические и полуэмпирические расчеты электронного строения атомов и молекул, интерпретировать полученные результаты;
- оценивать реакционную способность карбо- и гетероароматических структур.

владеть:

- неэмпирическими и полуэмпирическими методами расчетов;
- методами оценки реакционной способности.

4. Структура и содержание дисциплины «Основы квантово-химического моделирования и оценки реакционной способности органических соединений»

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов.

№ п/п	Раздел Дисциплины	Курс	Неделя	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся, и трудоемкость (в часах) Форма обуч.: очная/заочная					Формы текущего контроля успеваемости (по неделям) Форма промежуточной аттестации
				Лекций	Лабораторных	Практических	Сам. работа	Контроль сам. работы	
1	Тема 1. Основы современной теории химического строения.	1	1	1/1			17/17		Контрольная работа
2	Тема 2. Методы квантовой химии.	1	2	1/0			17/18		Задание в рамках самостоятельной работы
3	Тема 3. Межмолекулярное взаимодействие и его описание в квантовой химии.	1	3	1/1			17/17		Задание в рамках самостоятельной работы
4	Тема 4. Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов.	1	4	1/1			17/17		Задание в рамках самостоятельной работы
5	Тема 5. Анализ геометрического и электронного строения многоатомных молекул на основе метода МО	1	5	1/0			17/18		Задание в рамках самостоятельной работы
6	Тема 6. Теория реакционной способности органических соединений.	1	6	1/1			17/17		Задание в рамках самостоятельной работы
		1		6/4			102/104		Зачет

Содержание дисциплины

Тема 1. Основы современной теории химического строения. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. 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).

Тема 2. Полуэмпирические методы квантовой химии. Методы, использующие нулевое дифференциальное перекрывание. Расширенный метод Хюккеля. Метод Хюккеля для электронных систем. Возможности и ограничения применения полуэмпирических методов квантовой

химии. Неэмпирические методы. Методы с использованием функционалов матрицы плотности.

Тема 3. Межмолекулярное взаимодействие и его описание в квантовой химии. Ориентационная и индукционная составляющие. Дисперсионное взаимодействие. Ван-дер-Ваальсовы комплексы. Водородная связь.

Тема 4. Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов. Наиболее распространенные программные комплексы (MOPAC, GAUSSIAN и др.).

Тема 5. Анализ геометрического и электронного строения многоатомных молекул на основе метода МО. Органические соединения. Приближения, используемые при расчетах и при интерпретации электронного строения органических соединений. Эффекты среды. Моделирование интермедиатов и переходных структур.

Тема 6. Теория реакционной способности органических соединений. Индексы реакционной способности: индексы свободной валентности, заряды на атомах, индексы Фукуи, энергии катионной, анионной и радикальной локализации. Поиск структуры переходных состояний.

5. Образовательные технологии

В преподавании используются мультимедийные презентации, иллюстрации, таблицы, методические пособия.

В преподавании курса используются активные и интерактивные технологии проведения занятий в сочетании с внеаудиторной работой.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

В качестве средств текущего контроля используется 1 контрольная работа, а также выполняемые в рамках самостоятельной работы задания. Промежуточная аттестация (зачет) дает возможность выявить уровень профессиональной подготовки аспиранта по данной дисциплине.

Контрольная работа № 1

Основные положения современной теории химического строения.

Задание № 1

Подобрать подход и получить данные квантово-химического моделирования заданной структуры.

Задание № 2

С использованием различных методов оценить степень взаимодействия двух органических молекул, содержащих разнообразные функциональные группы.

Задание № 3

Провести расчет заданной структуры различными методами с использованием различных программных комплексов.

Задание № 4

Проанализировать результаты выполненных в **Задании № 3** расчетов и сделать заключение об особенностях геометрического и электронного строения.

Задание № 5

Поиск структуры переходного состояния для заданного процесса.

Вопросы к аттестации (зачету)

1. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение.
2. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул..

3. Поверхность потенциальной энергии.
4. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО).
5. Учет симметрии ядерной конфигурации при рассмотрении электронной задачи.
6. Полуэмпирические методы квантовой химии.
7. Неэмпирические методы квантовой химии.
8. Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов.
9. Межмолекулярное взаимодействие и его описание в квантовой химии.
10. Особенности квантово-химического моделирования строения гетероциклических ароматических соединений.
11. Индексы реакционной способности.
12. Моделирование промежуточных частиц.
13. Учет влияния среды в квантово-химическом моделировании.
14. Моделирование ППЭ для реакций карбо- и гетероароматических систем.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература: (не более двух наименований – желательно наличие в библиотеке)

Майер И. Избранные главы квантовой химии. - БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006

Грибов Л. А., Муштакова С. П. Квантовая химия. - Гардарики, 1999

б) дополнительная литература:

Русаков А. И., Мендкович А. С., Гулятья В. П., др. Структура и реакционная способность органических анион-радикалов. - Мир, 2005

Орлов В.Ю., Котов А.Д., Русаков А.И. Функционализация карбо- N,O-содержащих гетероароматических систем. - Мир, 2010

О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин. Органическая химия. В 4 ч. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. 2005. Ч.1, 568 с.; Ч. 2, 624 с.; Ч. 3. 544 с.; Ч. 4, 728 с.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

1. Журналы научной электронной библиотеки (elibrary.ru)

2. Журналы американского химического общества (<http://pubs.acs.org>)

3. Доступ к патентным базам данных компании Questel (<http://www.qpat.com/>)

4. Organic Chemistry Portal (<http://www.organic-chemistry.org/>)

5. Журналы Wiley-VCH (<http://www.wiley-vch.de/publish/en/journals/alphabeticalIndex/?sID=g2l06r5eqi7q28ioctnuhhimo1>)

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Вычислительный кластер T-Blade (НРС 0012800-001)

Программное обеспечение: пакеты квантовохимических программ

Компьютерный класс – 7 рабочих мест.

Программа составлена в соответствии с федеральными государственными требованиями к структуре основной профессиональной образовательной программы послевузовского профессионального образования (аспирантура) (приказ Минобрнауки от 16.03.2011 г. № 1365) с учетом рекомендаций, изложенных в письме Минобрнауки от 22.06.2011 г. № ИБ – 733/12.

Программа одобрена на заседании кафедры органической и биологической химии

17.10.2012 г. (протокол № 5)

Заведующий кафедрой

Орлов В.Ю., д.х.н., проф.

Автор

Орлов В.Ю., д.х.н., проф.