

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 13.03.2024 13:35:02
Уникальный программный ключ:
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)»

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной
и методической работе
_____ Б.В.Пекаревский
«_____» _____ 2023 г.

**Рабочая программа дисциплины
ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ХИМИИ**

Специальность

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Специализация

Химия материалов

Квалификация

Химик. Преподаватель химии

Форма обучения

Очная

Факультет **химии веществ и материалов**

Кафедра **физической химии**

Санкт-Петербург

2023

Б1.О.23

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	04
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы.....	05
3. Объем дисциплины	05
4. Содержание дисциплины.....	06
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	06
4.2. Формирование индикаторов достижения компетенций разделами дисциплины...	06
4.3. Занятия лекционного типа.....	07
4.4. Занятия семинарского типа.....	09
4.4.1. Семинары, практические занятия	09
4.4.2. Лабораторные занятия.....	12
4.5. Самостоятельная работа обучающихся	12
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	13
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации	13
7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины	15
8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.....	15
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины	16
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.....	16
10.1. Информационные технологии.....	16
10.2. Программное обеспечение.....	16
10.3. Базы данных и информационные справочные системы.....	16
11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы	16
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья	17
Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации...	18

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

В результате освоения образовательной программы специалитета обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
ОПК-1 Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	ОПК-1.5 Интерпретация результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ квантовой химии	Знать: основные термины, приближения и методы квантовой химии (ЗН-1); Уметь: пояснять связь между основными приближениями, методами и теориями квантовой химии (У-1); Владеть: навыками применения методов квантовой химии к описанию молекулярных систем (Н-1).
ОПК-5 Способен понимать принципы работы информационных технологий, использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности	ОПК-5.5 Выбор и использование квантовохимического метода расчета молекулярных свойств	Знать: примеры использования квантовохимического метода расчёта (ЗН-2); Уметь: выбирать один из методов квантовой химии для решения задач профессиональной деятельности (У-2); Владеть: навыками использования квантовохимического метода расчёта для решения задач профессиональной деятельности (Н-2).

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина относится к дисциплинам обязательной части (Б1.О.23), и изучается на 4 курсе в 7 семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «Введение в информационные технологии» и «Основы биохимии».

Полученные в процессе изучения дисциплины «Основы квантовой химии» знания, умения и навыки могут быть использованы при изучении дисциплины «Высокомолекулярные соединения», в научно-исследовательской работе, при прохождении производственной практики, при выполнении выпускной квалификационной работы и в последующей профессиональной деятельности.

3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, ЗЕ/академ. часов
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов)	5/ 180
Контактная работа с преподавателем:	117
занятия лекционного типа	36
занятия семинарского типа, в т.ч.	72
семинары, практические занятия	72
лабораторные работы	-
курсовое проектирование (КР или КП)	-
КСР	9
другие виды контактной работы	-
Самостоятельная работа	36
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)	Индивидуальные задания
Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, экзамен)	Экзамен/27

4. Содержание дисциплины.

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, академ. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, академ. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические	Лабораторные работы			
1	Основы теории квантовой химии	22	44	-	12	ОПК-1	ОПК-1.4
2	Квантово-химические расчёты	8	20	-	18	ОПК-1 ОПК-5	ОПК-1.4 ОПК-5.5
3	Современные вопросы и проблемы квантовой химии	6	8	-	6	ОПК-1 ОПК-5	ОПК-1.4 ОПК-5.5
	Итого	36	72		36		

4.2. Формирование индикаторов достижения компетенций разделами дисциплины

№ п/п	Код индикаторов достижения компетенции	Наименование раздела дисциплины
1	ОПК-1.4	1. Основы теории квантовой химии 2. Квантово-химические расчёты 3. Современные вопросы и проблемы квантовой химии
2	ОПК-5.5	2. Квантово-химические расчёты 3. Современные вопросы и проблемы квантовой химии

4.3. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	Основы теории квантовой химии. Атомно-молекулярное учение. История возникновения квантовой механики и квантовой химии. Основные определения и понятия. Аксиоматика квантовой механики. Волновая функция, временное и стационарное уравнения Шрёдингера, квантование состояний, принцип неопределённости Гейзенберга, гипотеза де Бройля. Операторы в квантовой механике. Собственная функция и собственное значение оператора. Спектр оператора. Условие нормировки.	4	ЛВ
1	Приближение независимых частиц, приближение центрального поля. Одноэлектронная волновая функция, метод Хартри, метод Хартри-Фока-Рутана. Метод самосогласованного поля. Теорема Хоэнберга-Кона, теория функционала плотности. Теорема вириала. Теорема Гельмана-Фейнмана. Силовой и энергетический аспекты описания химической связи.	4	ЛВ
1	Базисные функции, базисный набор. Функции Гауссова и Слэйтеровского типа. Номенклатура базисных наборов. Валентные, поляризационные и диффузные функции. Хартри-Фоковский предел.	2	ЛВ
1	Электрон-электронная корреляция и методы её учёта. Метод учёта корреляции базисными функция. Теория возмущений Моллера-Плессета. Метод многоконfigurационного взаимодействия. Теория связанных кластеров. Выражение для энергии корреляции, выражения для энергии молекулярных систем. Оператор возмущения и его вид.	2	ЛВ

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	Электронное строение молекул Теория атомов в молекуле Бейдера. Теория натуральных связывающих орбиталей Вейнхольда. Заряд атома, порядок связи, энергия связи, дипольный момент молекулы. Теория жёстких и мягких кислот и оснований. Высшая занятая и низшая незанятая молекулярные орбитали. Глобальные и локальные индексы реакционной способности молекул. Типы химической связи.	4	ЛВ
1	Полуэмпирические методы квантовой химии. Приближение нулевого дифференциального перекрывания. Параметризация метода. Сравнительная характеристика основных полуэмпирических методов CNDO, INDO, ZINDO, PM3, AM1, MNDO.	2	ЛВ
1	Электронное строение твёрдых тел. Свойство трансляционной симметрии. Функции Блоха. Зонная теория строения твёрдых тел. Схема приведённых зон Бриллюэна. Теория кристаллического поля. Теория поля лигандов.	2	ЛВ
2	Современные квантово-химические пакеты. Gaussian, Gamess, CFour, TurboMol, Orca, Crystall. Типы входных и выходных файлов, их структура и содержание. Виды квантово-химических расчётов. Оптимизация геометрии. Методы оптимизации.	2	ЛВ
2	Исследование поверхности потенциальной энергии, задача оптимизации геометрии. Понятие поверхности потенциальной энергии, характерные точки поверхности. Условия нахождения минимума, максимума, седловой точки. Понятие энергетического барьера. Конформационный анализ, распределение Больцмана.	2	ЛВ, КтСм
2	Электронные и колебательные спектры. Уравнение Шредингера для жесткого ротатора, гармонического осциллятора, их решение. Понятие ангармонизма. Силовые постоянные, их применение. Применение поправок на ангармонизм. Энергия нулевых колебаний.	2	ЛВ, КтСМ

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
2	Методы уменьшения времени расчёта. Метод последовательных расчётов с повышением уровня теории. Метод аппроксимации результатов расчётов. Композитные методы квантовой химии.	2	ЛВ
1	Методы учёта влияния растворителя. Учёт растворителя как континуума, методы рсг срст. Расчёт энергии Гиббса сольватации, энтальпии сольватации ионов и молекул.	2	ЛВ
3	Методы моделирования механизмов реакций. Особенности расчёта реакций электрофильного/нуклеофильного присоединения и/или замещения. Особенности расчёта радикальных реакций. Определение строения и энергии переходного состояния.	2	ЛВ
3	Понятие ароматичности, проблема определения понятия. Методы описания ароматических систем. Дескрипторы ароматичности NICS, ICSS, AICD. Описание ароматичности в рамках теории Бейдера.	2	ПЛ, КтСм
3	Квантово-химические методы термодинамических расчётов. Методы атомизации, метод изодесмических реакций. Композитные методы G3, G4, G4MP2, CBS, CBS-QB3.	2	ПЛ

4.4. Занятия семинарского типа.

4.4.1. Семинары, практические занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	Занятие 1. Применение гипотезы де Бройля в описании поведения частиц. Применение принципа неопределённости Гейзенберга для определения неопределённости в энергии, импульсе и пространственном положении частиц.	4	АТД

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	Занятие 2. Уравнение Шрёдингера для различных систем. Решения уравнения Шрёдингера для частицы в потенциальных ямах различной конфигурации.	4	МШ
1	Занятие 3. Атомные и молекулярные термы. Метод Хюккеля и его применение к сопряжённым системам. Молекулярные диаграммы.	4	МГ
1	Занятие 4. Решение уравнения Шрёдингера для атома водорода и молекулярного иона водорода. Метод валентных связей и метод молекулярных орбиталей.	4	МШ
1	Занятие 5. Физическая интерпретация квантовых чисел. Связь движения с моментом импульса.	2	
1	Занятие 6. Экспериментальные свидетельства существования спина. Опыт Штерна-Герлаха.	2	
2	Занятие 7. Знакомство с Gaussian16. Вступительная беседа. Знакомство с интерфейсом программы Gaussian16. Подготовка входного файла, анализ структуры и содержания выходного файла. Рассмотрение плана лабораторных работ.	2	АТД
2	Занятие 8. Оптимизация геометрии молекулы методом Хартри-Фока и методом теории функционала плотности.	2	АТД
2	Занятие 9. Влияние базисного набора на время и точность расчёта.	2	АТД
2	Занятие 10. Квантово-химическая трактовка результатов расчёта по теории жёстких мягких кислот и оснований	2	МШ
2	Занятие 11. Влияние учёта корреляции на точность расчёта энергии диссоциации молекул.	2	МШ
2	Занятие 12. Исследование поверхности потенциальной энергии. Конформационный анализ.	2	АТД
2	Занятие 13. Расчёт молекулярных свойств в Gaussian16. ИК и КР спектры. Применение поправок на ангармонизм.	2	АТД

№ раздела дисциплин ы	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационн ая форма
2	Занятие 14. Топологический анализ по теории Бейдера (AIM анализ).	2	АТД
2	Занятие 15. Анализ электронного строения молекул. Сравнительный анализ различных подходов к описанию электронного строения молекул.	2	МШ
2	Занятие 16. Локальные индексы реакционной способности. Функции Фукуи.	2	МШ
1	Занятие 17. Гармонический и ангармонический осциллятор. Решение уравнения Шрёдингера для осциллятора. Методы определения коэффициента ангармоничности.	4	АТД
1	Занятие 18. Жесткий ротатор. Решение уравнения Шрёдингера для жёсткого ротатора. Нахождение моментов инерции сложных молекулярных систем. Расчёт вращательных постоянных. Поправки на нежёсткость.	4	АТД
1	Занятие 19. Собственные значения и собственные функции эрмитовых операторов. Уравнения на собственные значения эрмитовых операторов. Принцип соответствия.	2	АТД
1	Занятие 20. Теоремы о собственных значениях и собственных функциях эрмитовых операторов. Ортогонализация по Лёвдину и по Шмидту.	4	АТД
1	Занятие 21. Оператор Гамильтона и оператор Фока для молекулярных систем. Построение системы уравнений Хартри Фока, Рутана.	2	АТД
1	Занятие 22. Методы учёта электронной корреляции. Выражение для энергии корреляции в различных молекулярных системах в различных приближениях. Методы CIS, CISD, MP2, MP4, CCS, CCSD, CCSD(T).	4	АТД

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	Занятие 23. Представление волновых функций и операторов векторами и матрицами. Примеры применения матриц в качестве операторов.	4	АТД
3	Занятие 24. Научный семинар «Современные возможности и проблемы квантовой химии»	8	КрСт

4.4.2. Лабораторные работы

В учебном плане не предусмотрены

4.5. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	Тема 1. Основы теории квантовой химии. Аксиоматика квантовой механики. Основные приближения и принципы. Методы расчёта атомов и молекул. Базисные наборы. Метод Хартри-Фока. Теория функционала плотности. Квантово-химические расчёты. Оптимизация геометрии.	4	Устный опрос, Тестирование, индивидуальные задания №2, 3
1	Тема 2. Метод молекулярных орбиталей. Молекулярные термы. Молекулярные диаграммы двухатомных молекул.	4	Устный опрос, тестирование, индивидуальное задание № 1
2	Тема 3. Теория жёстких и мягких кислот и оснований. НОМО и LUMO энергии. Глобальные и локальные индексы реакционной способности	4	Устный опрос, индивидуальные задания 4, 10
1	Тема 3. Электронная корреляция. Теория возмущений. Метод многоконфигурационного взаимодействия. Теория связанных кластеров..	4	Выполнение индивидуального задания №5

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
2	Тема 4. Исследование поверхности потенциальной энергии. Конформационный анализ. ИК и КР спектры молекул. Электронное строение молекул. Электронное строение молекул. Теория Бейдера, топологический анализ. Теория Вейнхольда.	8	Устный или письменный опрос, тестирование, выполнение индивидуальных заданий №6, 7, 8, 9
2	Тема 5. Высокоточные термодимические расчёты методами квантовой химии. Дескрипторы ароматичности. Современные проблемы квантовой химии.	6	Тестирование
3	Тема 6. Подготовка презентации и доклада к научному семинару «Современные возможности и проблемы квантовой химии»	6	Выступление на научном семинаре

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте: <https://media.technolog.edu.ru>

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме экзамена.

Экзамен предусматривает выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуются теоретическими вопросами (заданиями).

При сдаче экзамена студент получает три вопроса из перечня вопросов, время подготовки студента к устному ответу - до 45 мин.

Пример варианта вопросов на экзамене:

Вариант № 1

1. Атомно-молекулярное учение. Строение атома. Постулаты квантовой механики.
2. Высокоточные термодимические расчёты в квантовой химии. Методы G4, G4MP2, их применение для расчёта показателя константы депротонирования.
3. В ходе электронографического исследования некоторой органической молекулы обнаружилось, что длина одной из связей углерод-углерод этой молекулы значительно увеличена по сравнению с длиной схожей связи в других органических молекулах. (1,575 Å в данной молекуле при «стандартной» длине связи 1,450-1,490 Å). Предложите план исследования для определения причины такого удлинения.

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1

Результаты освоения дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций достигнут пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе – «удовлетворительно».

7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины

а) печатные издания:

1. Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия : Учебное пособие для вузов по химическим специальностям / В. И. Барановский. – Москва : Academia, 2008. – 383 с. – ISBN 978-5-7695-3961-9.

2. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твёрдые тела : Учебное пособие для вузов по химико-технологическим направлениям и специальностям / В. Г. Цирельсон. – Москва : Бином. Лаборатория знания, 2010. – 495 с. – ISBN 978-5-9963-0080-8.

3. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия : Учебное пособие для вузов / А. И. Ермаков. – Москва : Юрайт, 2010. – 555 с. – ISBN 978-5-9692-0331-0.

б) электронные учебные издания:

1. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твёрдые тела : Учебное пособие для вузов по химико-технологическим направлениям и специальностям / В. Г. Цирельсон. – 5-е изд., электрон. – Москва : Лаборатория знаний, 2021. – 522 с. – ISBN 978-5-93208-518-9 // Лань : электронно-библиотечная система. – URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 05.05.2023). - Режим доступа: по подписке.

8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.

Интернет-ресурсы: проводить поиск в различных системах, таких как www.yandex.ru, www.google.ru, www.rambler.ru, www.yahoo.ru и использовать материалы сайтов, рекомендованных преподавателем на лекционных занятиях.

С компьютеров института открыт доступ к:
<http://media.technolog.edu.ru> Учебный план, РПД и учебно-методические материалы.

Электронно-библиотечные системы:

<https://technolog.bibliotech.ru> «Электронный читальный зал – БиблиоТех»;
<http://e.lanbook.com> - Электронно-библиотечная система издательства «Лань», коллекции «Химия» (книги издательств «Лань», «Бином»), «Нанотехнологии» (книги издательства «Бином. Лаборатория знаний»);

www.elibrary.ru - eLIBRARY - научная электронная библиотека периодических изданий;

www.scopus.com - База данных рефератов и цитирования Scopus издательства Elsevier;

<http://webofknowledge.com> - Универсальная реферативная база данных научных публикаций Web of Science компании Thomson Reuters;

<http://iopscience.iop.org/journals?type=archive>, <http://iopscience.iop.org/page/subjects> - Издательство IOP (Великобритания);

www.oxfordjournals.org - Архив научных журналов издательства Oxford University Press;

<http://www.sciencemag.org/> - Полнотекстовый доступ к журналу Science (The American Association for the Advancement of Science (AAAS));

<http://www.nature.com> - Доступ к журналу Nature (Nature Publishing Group);

<http://pubs.acs.org> - Доступ к коллекции журналов Core + издательства American Chemical Society;

<http://journals.cambridge.org> - Полнотекстовый доступ к коллекции журналов Cambridge University Press.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Все виды занятий по дисциплине «Основы квантовой химии» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТП СПбГТИ 040-02. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования;

СТО СПбГТИ 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 016-2015. КС УКДВ. Порядок проведения зачетов и экзаменов.

Планирование времени, необходимого на изучение данной дисциплины, лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала.

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:

- плановость в организации учебной работы;
- серьезное отношение к изучению материала;
- постоянный самоконтроль.

На занятия студент должен приходить, имея знания по уже изученному материалу.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

10.1. Информационные технологии.

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий:

- чтение лекций с использованием слайд-презентаций;
- взаимодействие с обучающимися посредством ЭИОС.

10.2. Программное обеспечение.

Microsoft Office (Microsoft Excel); Gaussian16; MWFN (открытая лицензия).

10.3. Базы данных и информационные справочные системы.

База данных журналов РИНЦ.

11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы.

Учебная аудитория для проведения лекционных занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Основное оборудование: столы; стулья; доска; демонстрационный экран, проектор, компьютеры.

Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа.

Основное оборудование: столы; стулья; доска; демонстрационный экран; проектор; компьютеры.

Помещение для самостоятельной работы.

Основное оборудование: столы; стулья; проектор; экран; компьютеры с доступом к информационно-телекоммуникационной сети «Интернет».

12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебные процесс осуществляется в соответствии с Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГТИ(ТУ), утвержденным ректором 28.08.2014.

**Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по
дисциплине «Основы квантовой химии»**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
ОПК-1	Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	промежуточный
ОПК-5	Способен понимать принципы работы информационных технологий, использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности	промежуточный

2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
ОПК-1.4 Интерпретация результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ квантовой химии	Дает определения основным понятиям теории квантовой химии (ЗН-1)	Правильные ответы на вопросы №1-9 к экзамену	Дает определения основным понятиям теории квантовой химии. Записывает формулы, поясняющие основные квантовые эффекты и свойства с ошибками.	Дает определения основным понятиям теории квантовой химии. Записывает формулы, поясняющие основные квантовые эффекты и свойства с незначительными ошибками, с помощью наводящих вопросов преподавателя.	Дает определения основным понятиям теории квантовой химии. Записывает формулы, поясняющие основные квантовые эффекты и свойства. Может применить эти знания для решения своих научно-исследовательских задач.
	Поясняет связь между основными приближениями, методами и теориями квантовой химии (У-2)	Правильные ответы на вопросы № 10-17 к экзамену	Поясняет связь между основными приближениями, методами и теориями квантовой химии. Анализирует письменно и устно преимущества и недостатки различных методов и теорий квантовой химии с ошибками.	Поясняет связь между основными приближениями, методами и теориями квантовой химии. Анализирует письменно и устно преимущества и недостатки различных методов и теорий квантовой химии с помощью наводящих вопросов преподавателя.	Уверенно и без ошибок поясняет связь между основными приближениями, методами и теориями квантовой химии. Анализирует письменно и устно преимущества и недостатки различных методов и теорий квантовой химии.

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
	Демонстрирует навыки применения методов квантовой химии к описанию молекулярных систем (Н-2)	Правильные ответы на вопросы № 18-25 к экзамену	Демонстрирует навыки применения методов квантовой химии к описанию молекулярных систем, демонстрирует навыки по решению основных задач квантовой химии с ошибками.	Демонстрирует навыки применения методов квантовой химии к описанию молекулярных систем, демонстрирует навыки по решению основных задач квантовой химии с незначительными ошибками.	Демонстрирует навыки применения методов квантовой химии к описанию молекулярных систем. Без ошибок демонстрирует навыки по решению основных задач квантовой химии.
ОПК-5.5 Выбор и использование квантовохимического метода расчета молекулярных свойств	Приводит примеры использования квантовохимического расчёта (ЗН-2)	Правильные ответы на вопросы № 26-34, 42 к экзамену	Приводит примеры использования квантовохимического расчёта для описания строения и свойств молекулярных систем. Перечисляет основные квантово-химические пакеты и виды расчёта с ошибками.	Приводит примеры использования квантовохимического расчёта для описания строения и свойств молекулярных систем. Перечисляет основные квантово-химические пакеты и виды расчёта с незначительными ошибками.	Приводит примеры использования квантовохимического расчёта для описания строения и свойств молекулярных систем. Перечисляет основные квантово-химические пакеты и виды расчёта. Может применить эти знания для решения своих научно-исследовательских задач.
	Поясняет возможности и границы применимости методов квантовой химии (У-2)	Правильные ответы на вопросы № 35-41 к экзамену	Поясняет возможности и границы применимости методов квантовой химии. Сопоставляет и делает	Поясняет возможности и границы применимости методов квантовой химии. Сопоставляет и делает	Поясняет возможности и границы применимости методов квантовой химии. Сопоставляет и делает

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
			выводы о необходимости применения конкретного вида квантово-химического расчёта с ошибками.	выводы о необходимости применения конкретного вида квантово-химического расчёта с помощью наводящих вопросов преподавателя.	выводы о необходимости применения конкретного вида квантово-химического расчёта.
	Демонстрирует навыки использования квантовохимического расчёта для решения профессиональных задач (Н-2)	Правильные ответы на вопросы № 43-50 к экзамену	Демонстрирует навыки использования квантовохимического расчёта для решения профессиональных задач. Разрабатывает план квантово-химического исследования для решения задач профессиональной деятельности с ошибками.	Демонстрирует навыки использования квантовохимического расчёта для решения профессиональных задач. Разрабатывает план квантово-химического исследования для решения задач профессиональной деятельности с незначительными ошибками.	Демонстрирует навыки использования квантовохимического расчёта для решения профессиональных задач. Разрабатывает план квантово-химического исследования для решения задач профессиональной деятельности.

3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации
а) Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ОПК-1:

1. Атомно-молекулярное учение. Строение атома. Постулаты квантовой механики.
2. Операторы и их свойства. Определение самосопряжённого (эрмитового) оператора). Собственное значение и собственная функция оператора.
3. Принцип соответствия. Операторы физических величин.
4. Теоремы о собственных значениях и собственных функциях эрмитовых операторов.
5. Ортогонализация по Лёвдину и по Шмидту.
6. Уравнение Шрёдингера. Стационарное уравнение Шрёдингера. Общий вид решения стационарного уравнения Шрёдингера.
7. Решение уравнение Шрёдингера для потенциальной ямы при различной её конфигурации.
8. Модель жёсткого ротатора и гармонического осциллятора. Влияние ангармонизма на термохимические и геометрические параметры. Методы учёта ангармонизма.
9. Неравенство Гейзенберга. Эффект туннелирования.
10. Вариационный метод и линейный вариационный метод.
11. Приближение центрального поля. Движение электрона в центральном поле атома водорода.
12. Приближение независимых частиц. Одноэлектронная модель.
13. Метод самосогласованного поля. Система уравнений Хартри.
14. Антисимметричность волновой функции. Детерминант Слейтера.
15. Методы Хартри-Фока для атома и для молекулы. Оператор Фока.
16. Открытые и замкнутые оболочки. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока.
17. Метод Кона-Шэма. Основы теории функционала плотности. Теорема Хоэнберга-Кона.
18. Квантовохимическая трактовка решений уравнений Хартри-Фока. Индексы реакционной способности.
19. Приближение Борна-Оппенгеймера.
20. Метод молекулярных орбиталей. Метод МО ЛКАО. Уравнения Рутана.
21. Метод молекулярных орбиталей на примере молекулярного иона водорода. Применение метода МО к двухатомным молекулам.
22. Электронная корреляция. Метод многоконфигурационного взаимодействия и метод связанных кластеров.
23. Метод валентных связей. Применение метода ВС на примере молекулярного иона водорода.
24. Номенклатура базисных наборов. Минимальный и расширенные базисные наборы. Роль базисных функций в описании свойств молекул.
25. Полуэмпирические методы квантовой химии. Параметризация метода. Приближение нулевого дифференциального перекрытия.

б) Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ОПК-5:

26. Расчёты свойств молекул. Выбор метода и базиса расчёта в зависимости от рассчитываемых свойств.
27. Методы учёта влияния растворителя. Учёт растворителя как континуума. Модели поляризационного континуума.

28. Основы теории атомов в молекуле Бейдера. Топологический анализ электронной плотности. Критические точки связи, цикла, ядра, клетки и их свойства.
29. Энергетический и силовой аспекты описания химической связи. Теорема вириала. Теорема Гельмана-Фейнмана.
30. Основы теории натуральных связывающих орбиталей Вейнхольда.
31. Анализ заселённостей и кратности химической связи. Заряд и кратность по Малликену, в теории Бейдера и в теории Вейнхольда.
32. Теория кристаллического поля. Теория поля лигандов. Комплексы сильных и слабых полей. Эффект Яна-Теллера.
33. Основы квантовой химии твёрдого тела. Зонная структура твёрдого тела. Уровень Ферми. Методы расчёта волновой функции в твёрдом теле.
34. Квантовые эффекты в наноразмерных структурах. Квантовохимическое объяснение наноразмерных эффектов.
35. Методы уменьшения времени квантовохимических расчётов. Метод заморозки геометрических параметров. Метод последовательных расчётов. Метод аппроксимации.
36. Высокоточные термодинамические расчёты в квантовой химии. Методы G4, G4MP2, их применение для расчёта показателя константы депротонирования.
37. Экспериментальные методы высокоточного определения геометрических параметров кристаллов и молекул. Методы газовой электронографии, микроволновой спектроскопии, рентгеноструктурного анализа.
38. Точность квантовохимических расчётов. Сравнение результатов расчётов с экспериментальными ИК-спектрами, с экспериментальными данными о геометрических параметрах молекулы.
39. Исследование поверхности потенциальной энергии. Конформационный анализ. Исследование пути реакции.
40. Квантовохимическое описание химической реакции в газовой фазе. Путь химической реакции, координата реакции. Расчёт поверхности потенциальной энергии химической реакции и определение строения переходного состояния.
41. Методы определения преимущественной атаки электрофила или нуклеофила. Локальные индексы реакционной способности. Функции Фукуи.
42. Программное обеспечение для выполнения квантовохимических расчётов.
43. В ходе синтеза и исследования свойств некоторой органической молекулы обнаружилось, что на хроматографической колонке продукты реакции разделяются на мажоритарный и миноритарный продукты. В ЯМР спектре наблюдается некоторое отличие продуктов. Предложите план исследования для определения и последующего подтверждения строения продуктов синтеза.
44. В ходе исследования строения и свойств некоторой органической молекулы было определено, что она может существовать в нейтральной и цвиттер-ионной форме, которые отличаются положением одного из атомов водорода в молекуле. Кристалл соединения представляет собой цепочку из связанных нейтральной и цвиттер-ионной форм молекулы. Предложите план исследования для определения преимущественного строения исследуемой молекулы в воде.
45. В ходе исследования некоторого каталитического процесса обнаружилось, что в ходе химической реакции могут образовываться по меньшей мере два продукта реакции в зависимости от строения и метода получения катализатора, а также среды проведения процесса. Предложите план исследования для определения причины образования нескольких продуктов в ходе реакции и предсказания преимущественного направления реакции в зависимости от строения катализатора.
46. В ходе электронографического исследования некоторой органической молекулы обнаружилось, что длина одной из связей углерод-углерод этой молекулы значительно увеличена по сравнению с длиной схожей связи в других органических

- молекулах. (1,575 Å в данной молекуле при «стандартной» длине связи 1,450-1,490 Å). Предложите план исследования для определения причины такого удлинения.
47. В ходе рентгеноструктурного анализа кристалла некоторой органической молекулы возникло затруднение при определении положения одного из атомов водорода. Предложите план исследования для определения преимущественного положения атома водорода в кристалле.
 48. В ходе исследования присоединения некоторой аминокислоты к фуллерену возникло затруднение при определении строения продукта реакции. Ваши коллеги исследователи предположили, как минимум, три возможных пути присоединения аминокислоты к фуллерену. Предложите план исследования для определения преимущественного направления реакции и строения продукта реакции.
 49. В ходе исследования биологической активности некоторого ряда схожих по структуре органических молекул было обнаружено, что большей биологической активностью обладают молекулы, в которых больше электроноакцепторных заместителей. Однако ни одно из исследуемых веществ не обладает достаточной активностью. Предложите план исследования для определения влияния характера заместителей на биологическую активность и предсказания структуры молекулы вещества с нужной биологической активностью.
 50. Предоставьте и проанализируйте результаты выполненных Вами лабораторных работ в курсе «Основы квантовой химии».

При сдаче экзамена студент получает три вопроса из перечня, приведенного выше. Время подготовки студента к устному ответу на вопросы - до 45 мин.

4. Примеры индивидуальных заданий

Индивидуальное задание №1 – Химическая связь. Метод молекулярных орбиталей

1. Запишите электронные конфигурации атома А и атома В.
2. Запишите электронную конфигурацию молекулы АВ (за основу примите молекулярные орбитали гомоядерных молекул).
3. Нарисуйте схематически энергетическую диаграмму молекулы АВ.
4. Распределите электроны на электронных энергетических уровнях.
5. Определите терм основного электронного состояния молекулы АВ.
6. Определите порядок связи А-В.
7. Установите: обладает ли вещество АВ диамагнитными или парамагнитными свойствами?
8. Обладает ли молекула АВ электрическим диполем?
9. Как изменится энергия связи и равновесное межъядерное расстояние, если молекулу АВ перевести в состояние иона АВ⁺ ?
10. Как изменится энергия связи и равновесное межъядерное расстояние, если молекулу АВ перевести в состояние иона АВ⁻ ?
11. Рассчитайте энергию молекулярных орбиталей с помощью квантово-химических расчетов. Проанализируйте форму электронных облаков молекулярных орбиталей.
12. Постройте молекулярную диаграмму по результатам расчетов.
13. Определите энергии НОМОи LUMO орбиталей.
14. Оцените с помощью квантово-химических расчетов дипольный момент молекулы. Сравните с экспериментальным значением.

Вариант	Молекула АВ		
	НН	HLi	HN
1	LiH	LiLi	LiO
2	CH	CH	CC

Индивидуальное задание №2 – Оптимизация геометрии, влияние метода расчёта на время и точность расчёта

1. Подготовить входной файл программы Gaussian16, содержащий предполагаемую структуру молекулы в виде декартовых координат атомов либо Z-матрицы внутренних координат молекулы

2. Выполнить оптимизацию геометрии молекулы методом Хартри-Фока (HF) и теории функционала плотности (DFT). В методе теории функционала плотности использовать функционал B3LYP. Для расчёта использовать базисный набор 6-31G.

3. Полученные результаты сравнить с экспериментальными данными, провести сравнительный анализ точности и времени расчёта. В качестве экспериментальных данных использовать данные из научной или справочной литературы, полученные методом газовой электронографии, микроволновой спектроскопии и/или рентгено-структурного анализа.

4. Сделать выводы о влиянии метода расчёта на время и точность расчёта.

Индивидуальное задание №3 – Влияние базисного набора на время и точность расчёта

1. Выполнить оптимизацию геометрии молекулы методами Хартри-Фока (HF) и теории функционала плотности (DFT), используя базисные наборы: 3-21G, 6-31G, 6-31G(d,p), 6-311G, 6-311G(d,p). В методе теории функционала плотности использовать функционал B3LYP.

2. Полученные результаты сравнить с экспериментальными данными, провести сравнительный анализ точности и времени расчёта.

3. Выбрать оптимальный уровень теории исходя из точности и времени расчёта.

4. Сделать выводы о влиянии базисного набора на время и точность расчёта.

Индивидуальное задание №4 – Применение теории ЖМКО для трактовки результатов расчёта

1. Выполнить оптимизацию геометрии с выводом chk-файла для выбранной молекулы, а также для всех молекул из трёх наборов соединений: 1. 5-10 неорганических кислот; 2. 5-10 карбоновых кислот; 3. 5-10 аминов.

2. Определить энергии высшей занятой и низшей незанятой молекулярных орбиталей для всех молекул.

3. По теореме Купманса и в рамках теории жёстких и мягких кислот и оснований рассчитать для всех молекул: потенциал ионизации, энергию сродства к электрону, жёсткость, мягкость, индекс электрофильности, электронный химический потенциал.

4. Провести сравнительный анализ полученных результатов между собой и с общехимическими представлениями о свойствах рассчитанных соединений.

5. Определить, к какому классу соединений выбранная молекула ближе по значениям рассчитанных индексов.

6. Сделать выводы о применимости теории жёстких и мягких кислот и оснований к квантово-химической трактовке результатов расчётов.

Индивидуальное задание №5 – Влияние метода учёта корреляции на время и точность расчёта

1. Выполнить оптимизацию геометрии трёх двухатомных молекул, а также расчёт энергии изолированных атомов, из которых данные молекулы состоят. Расчёты провести методами Хартри-Фока (HF), методом теории Моллера-Плессета второго порядка (MP2), методом теории связанных кластеров (CCS, CCSD, CCSD(T)).

2. Используя полученные результаты рассчитать энергию диссоциации трёх двухатомных молекул. Сравнить расчётные данные с экспериментальными.

3. Проанализировать полученные результаты. Сделать вывод о влиянии метода учёта корреляции на время и точность расчёта.

Индивидуальное задание №6 – Исследование поверхности потенциальной энергии, конформационный анализ

1. Провести сканирование поверхности потенциальной энергии выбранной молекулы. Сканирование проводить по длине связи, валентному углу или двугранному углу. Метод и базис расчёта выбрать исходя из результатов индивидуального задания 3.

2. Определить количество и структуру конформеров. Структуру каждого из конформеров оптимизировать отдельно.

3. В областях максимумов потенциальной энергии провести дополнительное сканирование с целью более точного определения структуры и энергии переходных состояний.

4. Рассчитать величины барьеров перехода между конформерами, относительные энергии конформеров.

5. Рассчитать состав смеси конформеров используя распределение Больцмана.

Индивидуальное задание №7 – Расчёт ИК спектра

1. Для полученных в задании 6 конформеров провести расчёт колебательного спектра.

2. Построить теоретические ИК спектры конформеров с учётом поправки на ангармонизм.

3. Сравнить ИК спектры конформеров между собой и с экспериментальными данными. Провести отнесение не менее 5 наиболее интенсивных пиков в спектре к конкретным колебаниям.

4. Используя полученные результаты рассчитать энтальпийные барьеры конформационных переходов.

5. Сделать выводы о применимости квантово-химического расчёта для предсказания и анализа ИК спектра молекул.

Индивидуальное задание №8 – Топологический (AIM) анализ

1. Провести оптимизацию геометрии выбранной молекулы с выводом wfn файла.

2. Используя программу MultiWFN провести топологический анализ электронной плотности. Выявить критические точки связей, ядер, циклов и клеток. Рассчитать их характеристики и затем вывести их в отдельный файл.

3. Проанализировать полученные результаты на предмет адекватного описания молекулы, наличия водородных связей, стабильности отдельных связей и молекулы в целом. Построить молекулярный граф. Выявить влияние соседних атомов и функциональных групп на характеристики критических точек.

4. Сделать выводы о применимости топологического анализа к описанию электронного строения молекул.

Индивидуальное задание №9 – Сравнение различных подходов к описанию электронного строения молекул

1. Провести оптимизацию геометрии выбранной молекулы с выводом wfn файла и с расчётом по NBO анализу. Для NBO анализа вывести индексы связей по Вибергу.

2. По результатам расчёта определить порядки связей и заряды атомов по Малликену.

3. Определить заряды атомов по NBO и индексы связей Виберга.

4. Используя программу MultiWFN рассчитать заряды атомов по Бейдеру и порядки связей по лапласиану электронной плотности.

5. Провести сравнительный анализ полученных результатов. Сделать выводы о применимости различных подходов к описанию электронного строения молекул.

Индивидуальное задание №10 – Функции Фукуи как локальные индексы реакционной способности

1. На выбранном по результатам задания 3 уровне теории провести оптимизацию геометрии и вывод wfn файла для нейтральной, положительно и отрицательно заряженных форм выбранной молекулы и молекулы-производной бензола (на выбор).

2. С использованием программы MultiWFN рассчитать функции Фукуи и выполнить визуализацию результатов расчётов.

3. Полученные результаты проанализировать, выявить преимущественные места электрофильной и нуклеофильной атак. Сравнить полученные результаты с общехимическими представлениями. По возможности использовать подтвержденные данные по механизмам реакций нуклеофильно/электрофильного присоединения и/или замещения.

4. Сделать выводы о применимости функций Фукуи в качестве локальных индексов реакционной способности.

5. Типовые вопросы для подготовки к устному опросу

1. Кривые потенциальной энергии при образовании двух- и многоатомных молекул. Взаимосвязь с основными параметрами химической связи (энергия, длина, направленность, насыщаемость). примеры.

2. Различные подходы к определению электроотрицательностей элементов, применение к оценке степени ионности связи, ее прочности. Примеры.

3. Физико-химическая общность, различия, единый подход к описанию различных типов химической связи (ковалентной, ионной, полярной, металлической, донорноакцепторной, неполярной, водородной, Ван-дер-ваальсовой).

4. Расчетный аппарат условий гибридизации электронных орбиталей и определение пространственной структуры молекул.

5. Основы математического аппарата метода молекулярных орбиталей.

6. Анализ влияния типа кристаллической решетки на физические и химические свойства вещества. Границы применимости уравнений Борна, Борна-Майера, Капустинского.

7. Главное, орбитальное, магнитное и спиновое квантовые числа как решение уравнения Шредингера для одно- и многоэлектронных атомов и ионов.

8. Диаграммы молекулярных орбиталей гомо- и гетероядерных двухатомных молекул.

9. Молекулярные термы.

10. Методы определения структуры многоатомных молекул.

11. Основные приближения квантовой химии. Приближение центрального поля. Приближение независимых частиц. Одноэлектронные волновые функции. Принцип Паули и детерминант Слейтера.

12. Метод самосогласованного поля.

13. Процедура оптимизации. Методы оптимизации. Метод Ньютона, метод градиентного спуска.

14. Метод Хартри-Фока. Оператор Фока. Обменный и кулоновский интегралы. Блок-схема расчёта по методу Хартри-Фока.

15. Основы теории Кона-Шема. Теорема Хоенберга-Кона. Функционал электронной плотности. Виды функционала.

16. Метод Хартри-Фока для молекул. Уравнения Рутана. Открытые и закрытые оболочки. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока.

17. Методы учёта электронной корреляции. Метод многоконfigurационного взаимодействия. Теория возмущений. Теория связанных кластеров. Выражение для энергии корреляции в различных методах.

18. Номенклатура базисных наборов. Вид базисных функций.

19. Основы теории Бейдера.

20. Основы теории Вейнхольда.

6. Примерные темы сообщений на научном семинаре «Современные квантово-химические методы исследования строения и свойств молекул».

1. Методы учета электронной корреляции: метод конфигурационного взаимодействия (CI, FCI, MCSCF).

2. Теория возмущений (MP).

3. Методы объединенных кластеров (CC, CCD, CCSD).

4. Теория функционала плотности (DFT). Приближение локальной плотности. Методы градиентной коррекции. Гибридные методы.

5. Полуэмпирические методы (MNDO, AM1, PM3).

6. Программные квантово-химические продукты.

7. Применение квантовой химии в моделировании строения и свойств наноразмерных материалов.

8. Применение квантовой химии в моделировании строения и свойств композитных материалов.

9. Высокоточные термохимические расчёты методами квантовой химии.

10. Расчёт констант ионного равновесия органических веществ методами квантовой химии.

11. Расчёт констант скоростей реакций электрофильного и/или нуклеофильного замещения и/или присоединения методами квантовой химии.

12. Расчёт констант скоростей реакций радикального присоединения методами квантовой химии.

7. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений и навыков, характеризующих этапы формирования компетенций.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СПб ГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКДВ Порядок проведения зачетов и экзаменов.

По дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме экзамена.

Шкала оценивания на экзамене балльная («отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно»).