

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

**Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования "Пермский
государственный национальный исследовательский
университет"**

Кафедра органической химии

Авторы-составители: **Байбародских Даниил Владимирович
Шуров Сергей Николаевич**

Рабочая программа дисциплины

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА ЭЛЕМЕНТООРГАНИЧЕСКИХ
И ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ**

Код УМК 88787

Утверждено
Протокол №2
от «31» августа 2020 г.

Пермь, 2020

1. Наименование дисциплины

Квантово-химические методы расчета элементоорганических и гетероциклических соединений

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина входит в вариативную часть Блока « М.1 » образовательной программы по направлениям подготовки (специальностям):

Направление: **04.04.01** Химия
направленность Органическая химия

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

В результате освоения дисциплины **Квантово-химические методы расчета элементоорганических и гетероциклических соединений** у обучающегося должны быть сформированы следующие компетенции:

04.04.01 Химия (направленность : Органическая химия)

ПК.3 Способен проводить экспериментальные работы и обрабатывать полученные данные в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках с использованием различных методов и подходов

Индикаторы

ПК.3.1 Проводит экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в выбранной области химии с использованием различных методов и подходов

ПК.4 Способен проводить критический анализ полученных результатов и оценивать перспективы продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках

Индикаторы

ПК.4.1 Критически анализирует и грамотно интерпретирует полученные результаты исследований, выявляет их достоинства и недостатки

4. Объем и содержание дисциплины

Направления подготовки	04.04.01 Химия (направленность: Органическая химия)
форма обучения	очная
№№ триместров, выделенных для изучения дисциплины	2
Объем дисциплины (з.е.)	5
Объем дисциплины (ак.час.)	180
Контактная работа с преподавателем (ак.час.), в том числе:	60
Проведение лекционных занятий	24
Проведение практических занятий, семинаров	36
Самостоятельная работа (ак.час.)	120
Формы текущего контроля	Итоговое контрольное мероприятие (1) Письменное контрольное мероприятие (2)
Формы промежуточной аттестации	Экзамен (2 триместр)

5. Аннотированное описание содержания разделов и тем дисциплины

Квантово-химические методы расчета элементоорганических и гетероциклических соединений

Введение. Квантово-химические расчеты атомов

Терминология. Понятие о механизмах химических реакций. Квантово-химический аспект. Представление о поверхности потенциальной энергии (ППЭ).

Квантово-химические расчеты молекул

Топография ППЭ и свойства реагирующей системы. Критические точки. Область минимумов. Седловые точки ППЭ. Матрицы первых и вторых производных (матрица Гессе). переходные состояния

Современные пакеты квантово-химических программ

Путь химической реакции. Внутренняя координата реакции и путь минимальной энергии. Локализация переходных состояний на ППЭ. Теорема Маррела-Лейдлера.

Неэмпирические методы.

Неэмпирические методы ССП МО ЛКАО. Возможности и ограничения

Базисные наборы STO-NG.

Базисные наборы STO-NG, валентно-расщепленные базисные наборы: 3-21G, 6-31G, 6-311G, Компактная и диффузная составляющие

Базисные наборы 6-31G (d), 6-31G (d,p)

Поляризационные функции. Базисные наборы 6-31G (d), 6-31G (d,p)

Учет электронной корреляции.

Учет электронной корреляции. Теория Меллера-Плессета (MP2), метод функционала плотности. Функционал B3LYP.

Пакеты квантово-химических программ GAMESS (Firefly), ORCA, NWChem

Пакеты квантово-химических программ GAMESS (Firefly), ORCA, NWChem

Подготовка массива исходных данных. Ключевые слова, Z-матрица

Подготовка массива исходных для расчета пути методом координаты реакции в пакетах программ MORAC. Построение потенциальной кривой. Локализация переходного состояния. Процедуры TS и SADDLE.

проведение расчетов геометрического и электронного строения молекул, термодинамических характеристик

проведение расчетов геометрического и электронного строения молекул, термодинамических характеристик

Расчеты тестовых молекул

Расчеты тестовых молекул: этилен, формальдегид, фуран, тиофен, диметилцинк, метилмагнийхлорид, фениллитий)

Интерпретация результатов, сравнение с экспериментом

Формирование файла-выдачи результатов. Интерпретация результатов расчета. Сравнение с экспериментом

6. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Освоение дисциплины требует систематического изучения всех тем в той последовательности, в какой они указаны в рабочей программе.

Основными видами учебной работы являются аудиторские занятия. Их цель - расширить базовые знания обучающихся по осваиваемой дисциплине и систему теоретических ориентиров для последующего более глубокого освоения программного материала в ходе самостоятельной работы. Обучающемуся важно помнить, что контактная работа с преподавателем эффективно помогает ему овладеть программным материалом благодаря расстановке необходимых акцентов и удержанию внимания интонационными модуляциями голоса, а также подключением аудио-визуального механизма восприятия информации.

Самостоятельная работа преследует следующие цели:

- закрепление и совершенствование теоретических знаний, полученных на лекционных занятиях;
- формирование навыков подготовки текстовой составляющей информации учебного и научного назначения для размещения в различных информационных системах;
- совершенствование навыков поиска научных публикаций и образовательных ресурсов, размещенных в сети Интернет;
- самоконтроль освоения программного материала.

Обучающемуся необходимо помнить, что результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем во время проведения мероприятий текущего контроля и учитываются при промежуточной аттестации.

Обучающимся с ОВЗ и инвалидов предоставляется возможность выбора форм проведения мероприятий текущего контроля, альтернативных формам, предусмотренным рабочей программой дисциплины. Предусматривается возможность увеличения в пределах 1 академического часа времени, отводимого на выполнение контрольных мероприятий.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации.

При проведении текущего контроля применяются оценочные средства, обеспечивающие передачу информации, от обучающегося к преподавателю, с учетом психофизиологических особенностей здоровья обучающихся.

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

При самостоятельной работе обучающимся следует использовать:

- конспекты лекций;
- литературу из перечня основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля);
- текст лекций на электронных носителях;
- ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимые для освоения дисциплины;
- лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение из перечня информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине;
- методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

Основная:

1. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для вузов / В. Г. Цирельсон. — М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. — 496 с. : цв. ил. — (Учебник для высшей школы). — ISBN 978-5-9963-0080-8. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система БиблиоТех : [сайт]. <https://psu.bibliotech.ru/Reader/Book/8633>

Дополнительная:

1. Квантовая химия: VI всесоюзное совещание (Кишинев. 23-26 июня 1975 г.) ; тезисы докладов/Академия наук СССР , Институт химии.-Кишинев:Штиинца,1975.-198.-Библиогр. в конце докл.
2. Грандберг И. И. Органическая химия:учебник для сельскохозяйственных и биологических специальностей вузов/И. И. Грандберг.-Москва:Высшая школа,1987.-4791.-Предм. указ.: с. 465-474
3. Соловьев М. Е.,Соловьев М. М. Компьютерная химия/М. Е. Соловьев, М. М. Соловьев.-М.:СОЛОН-Пресс,2005, ISBN 5-98003-188-X.-536.-Библиогр.: с. 528-532
4. Кларк Т. Компьютерная химия:Практическое руководство по расчетам структуры и энергии молекулы/Т. Кларк ; пер. А. А. Коркин ; ред.: В. С. Мастрюков, Ю. Н. Панченко.-Москва:Мир,1990, ISBN 5-03-001325-3.-383.-Библиогр. в конце глав. - Предм. указ.: с. 382-383

9. Перечень ресурсов сети Интернет, необходимых для освоения дисциплины

При освоении дисциплины использование ресурсов сети Интернет не предусмотрено.

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

Образовательный процесс по дисциплине **Квантово-химические методы расчета элементоорганических и гетероциклических соединений** предполагает использование следующего программного обеспечения и информационных справочных систем:

презентационные материалы (слайды по темам лекционных и практических занятий);

доступ в режиме on-line в Электронную библиотечную систему (ЭБС)

доступ в электронную информационно-образовательную среду университета.

При освоении материала и выполнении заданий по дисциплине рекомендуется использование материалов, размещенных в Личных кабинетах обучающихся ЕТИС ПГНИУ (**student.psu.ru**).

При организации дистанционной работы и проведении занятий в режиме онлайн могут использоваться:

система видеоконференцсвязи на основе платформы BigBlueButton (<https://bigbluebutton.org/>).

система LMS Moodle (<http://e-learn.psu.ru/>), которая поддерживает возможность использования текстовых материалов и презентаций, аудио- и видеоконтент, а так же тесты, проверяемые задания, задания для совместной работы.

система тестирования Indigo (<https://indigotech.ru/>).

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Лекционные занятия - аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой (и) или маркерной доской.

Занятия семинарского типа (семинары, практические занятия) - аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой (и) или маркерной доской.

Самостоятельная работа - аудитория для самостоятельной работы, оснащенный компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет», обеспеченный доступом в электронную информационно-образовательную среду университета.

Помещения Научной библиотеки ПГНИУ

Помещения научной библиотеки ПГНИУ для обеспечения самостоятельной работы обучающихся:

1. Научно-библиографический отдел, корп.1, ауд. 142. Оборудован 3 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

2. Читальный зал гуманитарной литературы, корп. 2, ауд. 418. Оборудован 7 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

3. Читальный зал естественной литературы, корп.6, ауд. 107а. Оборудован 5 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

4. Отдел иностранной литературы, корп.2 ауд. 207. Оборудован 1 персональным компьютером с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

5. Библиотека юридического факультета, корп.9, ауд. 4. Оборудована 11 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

6. Читальный зал географического факультета, корп.8, ауд. 419. Оборудован 6 персональными

компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

Все компьютеры, установленные в помещениях научной библиотеки, оснащены следующим программным обеспечением:

Операционная система ALT Linux;

Офисный пакет Libreoffice.

Справочно-правовая система «КонсультантПлюс»

**Фонды оценочных средств для аттестации по дисциплине
Квантово-химические методы расчета элементоорганических и гетероциклических соединений**

**Планируемые результаты обучения по дисциплине для формирования компетенции.
Индикаторы и критерии их оценивания**

ПК.4

Способен проводить критический анализ полученных результатов и оценивать перспективы продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках

Индикатор	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
<p>ПК.4.1 Критически анализирует и грамотно интерпретирует полученные результаты исследований, выявляет их достоинства и недостатки</p>	<p>Знать: базовые теории и понятия избранной области химии Уметь: проводить критический анализ полученных результатов и оценивать перспективы продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках Владеть: теорией и навыками практической работы в избранной области химии</p>	<p style="text-align: center;">Неудовлетворител не знает базовые теории и понятия избранной области химии не умеет проводить критический анализ полученных результатов и оценивать перспективы продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках не владеет теорией и навыками практической работы в избранной области химии</p> <p style="text-align: center;">Удовлетворительн знает базовые теории и понятия избранной области химии не умеет проводить критический анализ полученных результатов и оценивать перспективы продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках не владеет теорией и навыками практической работы в избранной области химии</p> <p style="text-align: center;">Хорошо знает базовые теории и понятия избранной области химии умеет проводить критический анализ полученных результатов и оценивать перспективы продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках не владеет теорией и навыками практической работы в избранной области химии</p> <p style="text-align: center;">Отлично знает базовые теории и понятия избранной области химии умеет проводить критический анализ</p>

Индикатор	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
		<p align="center">Отлично</p> <p>полученных результатов и оценивать перспективы продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках владеет теорией и навыками практической работы в избранной области химии</p>

ПК.3

Способен проводить экспериментальные работы и обрабатывать полученные данные в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках с использованием различных методов и подходов

Индикатор	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
<p>ПК.3.1 Проводит экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в выбранной области химии с использованием различных методов и подходов</p>	<p>Знать: основные правила практической работы в лаборатории, обращения с реактивами, посудой и оборудованием и правила техники безопасности Уметь: проводить экспериментальные работы и обрабатывать полученные данные в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках с использованием различных методов и подходов Владеть: навыками экспериментальной работы в избранной области химии</p>	<p align="center">Неудовлетворител</p> <p>не знает: основные правила практической работы в лаборатории, обращения с реактивами, посудой и оборудованием и правила техники безопасности не умеет: проводить экспериментальные работы и обрабатывать полученные данные в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках с использованием различных методов и подходов не владеет: навыками экспериментальной работы в избранной области химии</p> <p align="center">Удовлетворительн</p> <p>знает: основные правила практической работы в лаборатории, обращения с реактивами, посудой и оборудованием и правила техники безопасности не умеет: проводить экспериментальные работы и обрабатывать полученные данные в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках с использованием различных методов и подходов не владеет: навыками экспериментальной работы в избранной области химии</p> <p align="center">Хорошо</p> <p>знает: основные правила практической работы в лаборатории, обращения с реактивами, посудой и оборудованием и правила техники безопасности</p>

Индикатор	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
		<p style="text-align: center;">Хорошо</p> <p>умеет:проводить экспериментальные работы и обрабатывать полученные данные в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках с использованием различных методов и подходов</p> <p>не владеет: навыками экспериментальной работы в избранной области химии</p> <p style="text-align: center;">Отлично</p> <p>знает: основные правила практической работы в лаборатории, обращения с реактивами, посудой и оборудованием и правила техники безопасности</p> <p>умеет:проводить экспериментальные работы и обрабатывать полученные данные в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках с использованием различных методов и подходов</p> <p>владеет: навыками экспериментальной работы в избранной области химии</p>

Оценочные средства текущего контроля и промежуточной аттестации

Схема доставки : Базовая

Вид мероприятия промежуточной аттестации : Экзамен

Способ проведения мероприятия промежуточной аттестации : Оценка по дисциплине в рамках промежуточной аттестации определяется на основе баллов, набранных обучающимся на контрольных мероприятиях, проводимых в течение учебного периода.

Максимальное количество баллов : 100

Конвертация баллов в отметки

«отлично» - от 81 до 100

«хорошо» - от 61 до 80

«удовлетворительно» - от 50 до 60

«неудовлетворительно» / «незачтено» менее 50 балла

Компетенция (индикатор)	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
ПК.3.1 Проводит экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в выбранной области химии с использованием различных методов и подходов ПК.4.1 Критически анализирует и грамотно интерпретирует полученные результаты исследований, выявляет их достоинства и недостатки	Подготовка массива исходных данных. Ключевые слова, Z-матрица Письменное контрольное мероприятие	Способен планировать работу и выбирать методы решения поставленных задач в области квантово-химического моделирования в программах GAMESS (Firefly), ORCA, NWChem
ПК.3.1 Проводит экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в выбранной области химии с использованием различных методов и подходов ПК.4.1 Критически анализирует и грамотно интерпретирует полученные результаты исследований, выявляет их достоинства и недостатки	Расчеты тестовых молекул Письменное контрольное мероприятие	Способен планировать работу и выбирать методы решения поставленных задач в области проведения расчетов геометрического и электронного строения молекул, термодинамических характеристик

Компетенция (индикатор)	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
ПК.3.1 Проводит экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в выбранной области химии с использованием различных методов и подходов ПК.4.1 Критически анализирует и грамотно интерпретирует полученные результаты исследований, выявляет их достоинства и недостатки	Итоговый контроль Итоговое контрольное мероприятие	Способен планировать работу и выбирать методы решения поставленных задач в области квантово-химических методов расчета элементоорганических и гетероциклических соединений

Спецификация мероприятий текущего контроля

Подготовка массива исходных данных. Ключевые слова, Z-матрица

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **6 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы самостоятельной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **30**

Проходной балл: **15**

Показатели оценивания	Баллы
Верное решение 3го задания контрольной работы	10
Верное решение 4го задания контрольной работы	10
Верное решение 1го задания контрольной работы	5
Верное решение 2го задания контрольной работы	5

Расчеты тестовых молекул

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **6 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы самостоятельной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **30**

Проходной балл: **15**

Показатели оценивания	Баллы
Верное решение 3го задания контрольной работы	10
Верное решение 4го задания контрольной работы	10
Верное решение 1го задания контрольной работы	5
Верное решение 2го задания контрольной работы	5

Итоговый контроль

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **10 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы самостоятельной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **40**

Проходной балл: **20**

Показатели оценивания	Баллы
Верное решение 1го задания контрольной работы	10
Верное решение 4го задания контрольной работы	10
Верное решение 3го задания контрольной работы	10
Верное решение 2го задания контрольной работы	10