

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

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

Кафедра органической химии

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

Рабочая программа дисциплины

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОРГАНИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Код УМК 92035

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

Пермь, 2020

1. Наименование дисциплины

Квантово-химическое моделирование органических реакций

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-химическое моделирование органических реакций** у обучающегося должны быть сформированы следующие компетенции:

04.04.01 Химия (направленность : Органическая химия)

ПК.2 Способен планировать работу и выбирать методы решения поставленных задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках

Индикаторы

ПК.2.2 Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов, готовит объекты, оборудование и реактивы исследования

4. Объем и содержание дисциплины

Направления подготовки	04.04.01 Химия (направленность: Органическая химия)
форма обучения	очная
№№ триместров, выделенных для изучения дисциплины	5
Объем дисциплины (з.е.)	3
Объем дисциплины (ак.час.)	108
Контактная работа с преподавателем (ак.час.), в том числе:	36
Проведение лекционных занятий	12
Проведение практических занятий, семинаров	24
Самостоятельная работа (ак.час.)	72
Формы текущего контроля	Защищаемое контрольное мероприятие (2) Итоговое контрольное мероприятие (1)
Формы промежуточной аттестации	Зачет (5 триместр)

5. Аннотированное описание содержания разделов и тем дисциплины

Квантово-химическое моделирование органических реакций. Первый семестр

1. Введение. Основные понятия.

1. Терминология.

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

2. Топография ППЭ и свойства реагирующей системы.

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

3. Путь химической реакции.

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

2. Квантово-химическое описание механизмов основных химических реакций.

1. Механизмы нуклеофильного замещения галогена в алифатическом ряду

Механизмы нуклеофильного замещения галогена в алифатическом ряду Механизмы SN1 и SN2. Активированные комплексы. Случай "вырожденной" реакции

2. Механизм замещения водорода в ароматическом ряду SE2Ar.

Механизм замещения водорода в ароматическом ряду SE2Ar. Активированный комплекс, структура сигма-аддукта

3. Перициклические реакции.

Перициклические реакции. Реакции согласованного (4+2)-циклоприсоединения. Особенности полуэмпирических методов. Биполярное (3+2)-циклоприсоединение. Активированные комплексы

3. Компьютерное моделирование органических реакций

1. Подготовка массива исходных для расчета пути методом координаты реакции в пакетах программ MORAC.

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

2. Уточнение строения активированного комплекса с помощью алгоритмов NLLSQ и SIGMA.

Уточнение строения активированного комплекса с помощью алгоритмов NLLSQ и SIGMA. Подтверждение корректности локализации переходного состояния. Анализ матрицы Гессе

3. Расчет барьеров внутреннего вращения, инверсии, электрофильной и нуклеофильной атаки.

Расчет барьеров внутреннего вращения, инверсии, электрофильной и нуклеофильной атаки.

4. Формирование файла-выдачи результатов.

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. 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

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-химическое моделирование органических реакций** 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 выполнения 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 компьютера 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-химическое моделирование органических реакций**

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

ПК.2

**Способен планировать работу и выбирать методы решения поставленных задач в
выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках**

Индикатор	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
<p>ПК.2.2 Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов, готовит объекты, оборудование и реактивы исследования</p>	<p>Знать: теоретические основы традиционных и новых разделов химии Уметь: проводить сбор, анализ и обработку литературных данных для решения поставленной задачи в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках Владеть: теорией и навыками практической работы в избранной области химии</p>	<p align="center">Неудовлетворител не знает: теоретические основы традиционных и новых разделов химии не умеет: проводить сбор, анализ и обработку литературных данных для решения поставленной задачи в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках не владеет: теорией и навыками практической работы в избранной области химии</p> <p align="center">Удовлетворительн знает: теоретические основы традиционных и новых разделов химии не умеет: проводить сбор, анализ и обработку литературных данных для решения поставленной задачи в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках не владеет: теорией и навыками практической работы в избранной области химии</p> <p align="center">Хорошо знает: теоретические основы традиционных и новых разделов химии умеет: проводить сбор, анализ и обработку литературных данных для решения поставленной задачи в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках не владеет: теорией и навыками практической работы в избранной области химии</p> <p align="center">Отлично знает: теоретические основы традиционных и новых разделов химии</p>

Индикатор	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
		<p style="text-align: center;">Отлично</p> <p>умеет: проводить сбор, анализ и обработку литературных данных для решения поставленной задачи в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках владеет: теорией и навыками практической работы в избранной области химии</p>

Оценочные средства текущего контроля и промежуточной аттестации

Схема доставки : Базовая

Вид мероприятия промежуточной аттестации : Зачет

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.2.2 Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов, готовит объекты, оборудование и реактивы исследования	1. Механизмы нуклеофильного замещения галогена в алифатическом ряду Защищаемое контрольное мероприятие	Способен планировать работу и выбирать методы решения поставленных задач в области квантово-химического моделирования органических реакций
ПК.2.2 Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов, готовит объекты, оборудование и реактивы исследования	1. Подготовка массива исходных для расчета пути методом координаты реакции в пакетах программ МОРАС. Защищаемое контрольное мероприятие	Способен планировать работу и выбирать методы решения поставленных задач в области квантово-химического описания механизмов основных химических реакций.
ПК.2.2 Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов, готовит объекты, оборудование и реактивы исследования	Итоговый контроль Итоговое контрольное мероприятие	Способен планировать работу и выбирать методы решения поставленных задач в области компьютерного моделирования органических реакций

Спецификация мероприятий текущего контроля

1. Механизмы нуклеофильного замещения галогена в алифатическом ряду

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **.5 часа**

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

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

Проходной балл: **15**

Показатели оценивания	Баллы
Решено 5е задание контрольной работы	5
Решено 6е задание контрольной работы	5
Решено 4е задание контрольной работы	5
Решено 2е задание контрольной работы	5
Решено 3е задание контрольной работы	5
Решено 1е задание контрольной работы	5

1. Подготовка массива исходных для расчета пути методом координаты реакции в пакетах программ МОРАС.

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **.5 часа**

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

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

Проходной балл: **15**

Показатели оценивания	Баллы
Решено 1е задание контрольной работы	5
Решено 2е задание контрольной работы	5
Решено 6е задание контрольной работы	5
Решено 4е задание контрольной работы	5
Решено 5е задание контрольной работы	5
Решено 3е задание контрольной работы	5

Итоговый контроль

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **1 часа**

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

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

Проходной балл: **20**

Показатели оценивания	Баллы
Решено 1е задание контрольной работы	10
Решено 4е задание контрольной работы	10
Решено 3е задание контрольной работы	10
Решено 2е задание контрольной работы	10