

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Современные теории химической связи

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Нефтехимия и катализ

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
 - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
 - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Программу дисциплины разработал(а)(и) старший научный сотрудник, к.н. Маджидов Т.И. (НИЛ Хемоинформатика и молекулярное моделирование, Химический институт им. А.М. Бутлерова), Timur.Madzhidov@kpfu.ru ; доцент, к.н. (доцент) Штырлин В.Г. (Кафедра неорганической химии, Химический институт им. А.М. Бутлерова), Valery.Shtyrlin@kpfu.ru

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-1	способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу (ОК-1);
ОК-3	готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала (ОК-3);
ОПК-1	способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач (ОПК-1);
ОПК-3	способностью реализовать нормы техники безопасности в лабораторных и технологических условиях (ОПК-3);
ПК-1	способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты (ПК-1);
ПК-2	владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии (ПК-2);
ПК-3	готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований (ПК-3);
ПК-4	способностью участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати) (ПК-4);
ПК-5	владением навыками составления планов, программ, проектов и других директивных документов (ПК-5);
ПК-6	способностью определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения, брать на себя ответственность за результат деятельности (ПК-6);
ПК-7	владением методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных организациях высшего образования (ПК-7).

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

- основы геометрического и алгебраического подходов к теории симметрии для молекул и твердых тел;
- основы современных методов описания химической связи;
- представления об особенностях различных типов химической связи в газовой фазе и конденсированном состоянии.

Должен уметь:

- анализировать данные расчетов параметров химической связи веществ в различных агрегатных состояниях;
- ориентироваться в литературе, касающейся описания различных типов химической связи.

Должен владеть:

- основами описания симметрии молекул и твердых тел;
- техникой расчетов параметров химической связи веществ в различных агрегатных состояниях.

Должен демонстрировать способность и готовность:

- применять геометрический и алгебраический подходы к теории симметрии для характеристики молекул и твердых тел;
- использовать основы современных методов описания химической связи молекул, супрамолекулярных структур и твердых тел;
- обсуждать особенности различных типов химической связи в газовой фазе и конденсированном состоянии;
- анализировать данные расчетов параметров химической связи веществ в различных агрегатных состояниях;
- ориентироваться в литературе, касающейся описания различных типов химической связи;
- рассчитывать параметры химической связи веществ в различных агрегатных состояниях.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.Б.4 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.04.01 "Химия (Нефтехимия и катализ)" и относится к базовой (общепрофессиональной) части.

Осваивается на 1 курсе в 2 семестре.

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных(ые) единиц(ы) на 144 часа(ов).

Контактная работа - 40 часа(ов), в том числе лекции - 20 часа(ов), практические занятия - 20 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 104 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 0 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет во 2 семестре.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи: Геометрический подход	2	2	2	0	12
2.	Тема 2. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в молекулах: Алгебраический подход (теория групп).	2	2	2	0	12
3.	Тема 3. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в твердых телах.	2	2	2	0	12
4.	Тема 4. Квантовая химия молекул: основные принципы.	2	2	2	0	12
5.	Тема 5. Квантовая химия молекул: расчеты структур методом функционала плотности.	2	2	2	0	12
6.	Тема 6. Описание молекул в теории Бейдера "Атомы в молекулах".	2	2	2	0	8
7.	Тема 7. Расчеты структур молекул с учетом эффектов среды.	2	2	2	0	8
8.	Тема 8. Химическая связь в координационных соединениях.	2	2	2	0	8

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
9.	Тема 9. Электронная структура твердых тел.	2	2	2	0	8
10.	Тема 10. Квантово-химический анализ межмолекулярных взаимодействий	2	2	2	0	12
	Итого		20	20	0	104

4.2 Содержание дисциплины (модуля)

Тема 1. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи: Геометрический подход

Элементы и операции точечной симметрии. Описание симметрии стереохимически нежестких структур. Применение теории симметрии к установлению наличия оптической активности, дипольного момента, эквивалентных атомов, диастереотопии молекул.

Понятие симметрии в философии и естествознании. Дедуктивно-аксиоматический метод в теории симметрии. Геометрический подход к теории симметрии. Определение точечной симметрии. Пять операций и элементов точечной симметрии. Собственное вращение вокруг оси симметрии, порядок оси вращения. Правила ориентации молекул относительно системы координат. Отражение в плоскости симметрии, преобразование координат при отражении в плоскости симметрии. Несобственное вращение, количество операций несобственного вращения при нечетном и четном порядке оси поворота. Инверсия, преобразование координат при операции инверсии. Тождественное преобразование (операция идентичности), формальный и содержательный смысл операции идентичности. Точечные группы симметрии. Определение точечной группы. Системы обозначений точечных групп Шенфлиса и Германа-Могена (международная). Четыре типа точечных групп: 1) простейшие группы - C₁, CS, Ci; 2) циклические группы - C_n, S_n, C_{nv}, C_{nh}; 3) диэдрические группы - D_n, D_{nh}, D_{nd}; 4) T_d, T_h, T; O_h, O (кубические группы); I_h, I. Правильные многогранники (тела Платона). Примеры молекул, относящихся к различным группам симметрии, и количество операций симметрии в этих группах. Архимедовы и каталановы тела. Особенности непрерывных точечных групп C_∞v, D_∞h и Rh(3). Параметрические группы Ли. Алгоритм определения точечной группы симметрии молекул. Некоторые проблемы строения молекул, решаемые геометрическим подходом к теории симметрии. Строгий критерий оптической активности молекул, группы симметрии оптически активных молекул ? C₁, C_n, D_n, O, I, R(3). Группы симметрии молекул, обладающих дипольным моментом ? C₁, CS, C_n, C_{nv} и C_∞v. Проблема эквивалентных и неэквивалентных атомов. Изохронность, диастереотопия и прохиральность. Стереохимически нежесткие структуры комплексов. Изодинамические операции. Супергруппы Шредингера.

Тема 2. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в молекулах: Алгебраический подход (теория групп).

Основные свойства математической группы. Таблица умножения для группы. Подгруппы, циклические и абелевы группы. Классы сопряженных элементов. Преобразование подобия для матриц. Представления групп. Неприводимые представления. Редукция приводимых представлений. Неприводимые представления и классификация термов. Термы многоэлектронных состояний. Редукция по симметрии термов многоэлектронных систем. Правила отбора для матричных элементов. Симметрия молекулярных орбиталей.

Алгебраический подход к теории симметрии. Композиция (произведение) операций симметрии. Группы с коммутирующими операциями (абелевы) и некоммутирующими операциями (неабелевы). Примеры произведения операций в группах $C2v$ (молекула H_2O) и $D3h$ (молекула BF_3). Математическое определение группы. Четыре основных свойства математической группы: 1) композиция любых двух элементов группы дает элемент, также принадлежащий данной группе (условие замкнутости); 2) для любых элементов группы выполняется ассоциативный закон (групповые свойства); 3) существует единственный единичный элемент (E), коммутирующий с любым другим элементом группы и дающий в произведении с ним этот же элемент; 4) для каждого элемента группы (A) существует обратный ему элемент (A^{-1}), коммутирующий с ним и дающий в произведении с ним единичный элемент. Примеры групп. Таблица умножения для группы. Свойства таблицы умножения для группы. Построение таблицы умножения для абстрактной группы из трех элементов $? E, A$ и B . Подгруппы, циклические группы. Порождающие множества и определяющие соотношения группы. Смежные классы. Индекс группы. Теорема Лагранжа. Преобразование подобия (операция сопряжения). Три свойства операции сопряжения: 1) каждый элемент группы сопряжен сам с собой; 2) если элемент A сопряжен с элементом B , то и B сопряжен с A ; 3) если элемент A сопряжен с элементами B и C , то B и C сопряжены между собой. Классы сопряженных элементов. Сопряженные подгруппы. Инвариантная подгруппа (нормальный делитель группы). Фактор-группа. Произведения групп, прямые и полуправые произведения. Иерархия точечных групп (генераторы и произведения точечных групп). Симметрическая группа перестановок. Теорема Кэли. Преобразование подобия для матриц. Пример преобразования подобия с помощью векторов и матриц при повороте системы координат. Матрицы преобразований для операций симметрии. Матрица поворота в трехмерном пространстве, унитарность матрицы поворота. Матрицы преобразований для всех генераторов точечных групп симметрии. Отображения, изо- и гомоморфизм. Определение представления группы. Определение неприводимого представления группы. Три главных свойства неприводимых представлений: 1) число неприводимых представлений группы равно числу ее классов; 2) сумма квадратов размерностей неприводимых представлений равна порядку группы; 3) если неприводимые представления группы одномерны, то они сами образуют группу. Соотношения ортогональности. Операторы проектирования. Таблицы характеров групп. Неприводимые представления и таблицы характеров групп $C2$ и $C3$. Таблицы характеров наиболее важных точечных групп симметрии. Неприводимые представления симметрических групп перестановок $S(n)$. Схемы Юнга.

Тема 3. Теория симметрии в применении к проблемам химической связи в твердых телах.

Операции открытой симметрии. Кристаллические системы. Решетки Бравэ. Пространственные группы. Антисимметрия. Магнитные и цветные группы симметрии.

Соответствие обозначений точечных групп симметрии в системах Шёнфлиса и Германа-Могена. Элементы и операции открытой симметрии кристаллов. Винтовая ось. Симметрия решетки: допустимые порядки поворотных и инверсионных осей. Плоскость скользящего отражения. Центрирующий оператор. Кристаллические системы и решетки Бравэ. Пространственные группы. Распределение точечных и пространственных групп по сингониям. Голоэдрические группы. Симморфные и несимморфные пространственные группы. Обозначения пространственных групп. Соответственные элементы открытой и закрытой симметрии. Понятие обобщенной симметрии. Операция антисимметрии. Группы антисимметрии (магнитные или шубниковские группы). Примеры точечных групп антисимметрии: $1?$, $2?/m?$, $4?$, $32?$. Цветные (беловские) группы. Некоторые применения теории симметрии в отношении кристаллов: 1) описания магнитно-упорядоченных кристаллов с помощью групп антисимметрии и цветных групп; 2) описание тензоров физических свойств кристаллов; 3) описание пиро- и пьезоэффекта; 4) описание двулучепреломления, оптической активности и энантиоморфизма кристаллов. Квазикристаллы. Двухфрагментальная модель двумерного квазикристалла паркет Пенроуза. Стандартная схема применения теории симметрии для решения физико-химических задач: 1) определяется симметрия системы; 2) составляется приводимое представление на состояниях системы; 3) проводится разложение приводимого представления на НП; 4) на основе НП классифицируются энергетические спектры и стационарные состояния системы, определяются матричные элементы и проводятся вычисления по теории возмущений (в последнем случае представление гамильтонiana системы как суммы последовательно убывающих членов отражает постепенное понижение симметрии от исходной группы симметрии к ее подгруппам). Любые функции, описывающие какие-либо свойства системы, обязательно преобразуются по неприводимым представлениям этой системы.

Тема 4. Квантовая химия молекул: основные принципы.

Уравнение Шредингера для молекул. Приближение Борна-Оппенгеймера. Обменное взаимодействие. Электронная плотность в молекулах. Метод самосогласованного поля. Базисные наборы. Молекулярные интегралы. Электронная корреляция.

Основные принципы квантовой механики: 1) Дуализм волна-частица; 2) принцип неопределенности Гейзенберга; 3) Описание эволюции системы волновой функцией в функциональном гильбертовом пространстве; 4) Принцип суперпозиции; 5) каждой динамической переменной ставится в соответствие линейный самосопряженный оператор (Эрмитов оператор. Полная ортонормированная система собственных функций ? базис. Унитарные преобразования. Коммутатор. Операторы основных физических величин: координата, импульс, угловой момент, кинетическая энергия, потенциальная энергия, полная энергия.); 5) Эволюцию квантовой системы во времени определяет оператор Гамильтона (неstationарное и стационарное уравнения Шредингера); 6) Значения измеряемых величин являются решениями уравнения на собственные значения оператора; 7) Средние значения величин определяются интегралами (чистые и смешанные состояния); 8) Все одинаковые частицы тождественны (принцип неразличимости электронов). Решение уравнения Шредингера для атома водорода (нормированные присоединенные полиномы Лежандра, сферические гармоники, обобщенные полиномы Ляггера, функция радиального распределения). Многоэлектронные атомы. Вариационный принцип. Интеграл перекрывания. Метод неопределенных множителей Лагранжа. Линейный вариационный метод Ритца. Теорема вириала для точных волновых функций. Метод преобразования масштаба волновой функции. Одноэлектронная модель для многоэлектронного атома (пренебрежение межэлектронным отталкиванием). Одноэлектронные волновые функции (орбитали). Волновая функция Хартри. Метод самосогласованного поля (ССП). Система уравнений Хартри. Приближение центрального поля. Орбитали слейтеровского типа (ОСТ, СТО). Угловые части атомных орбиталей. Действительные угловые части волновой функции атома с центральным полем. Принцип Паули и структура многоэлектронной волновой функции. Спин-орбиталь. Детерминант Слейтера. Метод Хартри-Фока. Оператор Фока (фокиан). Одноэлектронный интеграл. Двухэлектронный кулоновский интеграл. Двухэлектронный обменный интеграл. Полная энергия атома с замкнутыми электронными оболочками в методе Хартри-Фока. Схема итерационного (самосогласованного) решения уравнений Хартри-Фока. Неограниченный метод Хартри-Фока (НХФ, UHF). Ограниченный метод Хартри-Фока с открытыми оболочками (ОХФ-ОО, OSRHF). НХФ-нестабильные решения.

Тема 5. Квантовая химия молекул: расчеты структур методом функционала плотности.

Функционал энергии. Уравнения Кона-Шэма. Обменно-корреляционные функционалы и результаты их применения к расчетам различных структур молекул.

Выражение для электронной плотности в основном состоянии. Функционал электронной плотности. Теорема Хоэнберга-Кона: теория функционала плотности (ТФП, DFT). Усовершенствованная модель Томаса-Ферми. Электронная плотность основного состояния невзаимодействующих электронов. Одноэлектронные уравнения Кона-Шэма (с локальным потенциалом). Электростатический потенциал, создаваемый электронами и ядрами. Обменно-корреляционный потенциал. Решения методом самосогласованного поля: ограниченный и неограниченный (спин-поляризованный) методы Кона-Шэма. Энергии одноэлектронных состояний в ТФП. Приближение Борна-Оппенгеймера. Одноэлектронные уравнения для молекул. Метод Хартри-Фока. Молекулярные спин-орбитали. Если волновая функция построена из пространственных орбиталей, занятых парой электронов с противоположными спинами (молекулы с замкнутыми оболочками), являясь собственной функцией оператора квадрата полного спина S^2 , то реализуется ограниченный метод Хартри-Фока (ОХФ). Если требование быть собственной функцией S^2 на волновую функцию не накладываются и электроны с противоположными спинами занимают разные молекулярные спин-орбитали, то реализуется неограниченный метод Хартри-Фока (НХФ). Существует вариант ограниченного метода Хартри-Фока для открытых оболочек (ОХФ-ОО). Матрица Гессе (гессиан). Поправка на энергию нулевых колебаний. Приближение МО ЛКАО. Уравнения Рутана. Уравнения Хартри-Фока-Рутана. Элементы матрицы оператора Фока. Матрица зарядов и порядков связей (матрица плотности). Блок-схема процесса решения уравнений Рутана. Дilemma симметрии. Методы учета электронной корреляции в орбитальных моделях. Энергия корреляции. Метод конфигурационного взаимодействия (КВ, СІ). Разложение многоэлектронной волновой функции в ряд по линейным комбинациям детерминантов Слейтера. Матричные элементы $|\Psi_0|H|\Psi_k\rangle$ равны нулю для случая однократно замещенных конфигураций (теорема Бриллюэна), а также трех и более замещенных конфигураций (правило Кондона-Слейтера), отсюда следует приближение CISD (configuration interaction singles and doubles), а на следующем уровне - CISDT и CISDTQ. Многоконфигурационный метод самосогласованного поля (МК ССП, MCSCF). ССП-метод полного активного пространства орбиталей (CASSCF) ? Н3МО, В3МО, а также ССП-метод ограниченного АПО (RASSCF) и MRCI. Теория возмущений. Теория возмущений Мёллера-Плессета (MP). Методы MP2, MP3, MP4, ? MP4SDT (single, double, triple ? возбужденные конфигурации). Метод связанных кластеров (coupled clusters, CC). Схема связанных кластеров с одно- и двукратными возбуждениями (CCSD), а также частичным учетом трех- (CCSD(T)) и четырехкратных возбуждений (CCSD(TQ)). Квадратичный метод связанных кластеров (QCCSD), обеспечивающий пропорциональность между энергией системы и связывающих ее подсистем. Метод валентных связей (valence bond, VB). Ψ_{iVB} ? валентные (резонансные) структуры, составленные из АО полного набора атомов, являются собственными функциями оператора S^2 . Валентное состояние атома не является собственной функцией операторов L_2, L_z, S_2, S_z и спектроскопически наблюдаемо. Карты разности электронных плотностей. Метод Кона-Шэма для молекул. Функционал электронной энергии. Эффективный одноэлектронный оператор Кона-Шэма. Обменно-корреляционный потенциал. Решение методом самосогласованного поля. Ограниченный и неограниченный (спин-поляризованный) методы Кона-Шэма. Обменно-корреляционная энергия, приходящаяся на один электрон, e_h и e_c .

Тема 6. Описание молекул в теории Бейдера "Атомы в молекулах".

Топологический анализ распределения электронной плотности.

Подход Бейдера (энергетический аспект). Принцип стационарного действия Швингера. Функция Лагранжа. Уравнение движения Лагранжа. Среднее значение наблюдаемой величины в стационарном состоянии. Теорема вириала для всей системы. Одноэлектронная (?шредингеровская?) плотность кинетической энергии. Одноэлектронная плотность лагранжиана для стационарного состояния. Локальная форма теоремы вириала. Полная плотность электронной энергии. Полная электронная энергия молекулы. Подход Бейдера (топологический аспект). Вектор градиента электронной плотности. Критические точки (КТ). Поле градиента электронной плотности. Градиентные пути. Ядра служат аттракторами множества градиентных путей. Бассейн аттрактора или атома. Электронная заселенность атома. Заряд по Бейдеру. Типы критических точек. Диагонализация гессиана и его собственные значения. Ранг и сигнатура критической точки. Четыре типа критических точек, обозначаемых (ранг; сигнатура): максимум (3;-3) ? аттрактор (NACP); седловая (3;-1) ? КТ связи (BCP); седловая (3;+1) ? КТ кольца (RCP); минимум (3;+3) ? КТ клетки (CCP). Соотношение Пуанкаре-Хопфа: NACP ? BCP ? RCP ? CCP = 1. Межатомная поверхность. Линия межатомного взаимодействия. Связевой путь. Связь любого порядка между двумя атомами выражается одним связевым путем. Характеристики связи: электронная плотность в критической точке связи; лапласиан электронной плотности в критической точке; эллиптичность; плотность электронной энергии (энергия Кремера-Крака). Критерии Наканиши-Хаяши-Нарахара для различных типов взаимодействия: ван-дер-ваальсовые связи; водородные связи; комплексы с переносом заряда; слабые ковалентные связи; ковалентные связи. Градиентное поле электронной плотности молекулы фуллерена C60. Трехмерное изображение атомных бассейнов. Молекулярные графы молекул некоторых углеводородов. Значение ЭП в критической точке связи (pb) связано с длиной линии связи (L): $pb = aL + d$. Величина pb коррелирует с кратностью связи (n): $n = \exp[A(pb - B)]$ (формула Льюиса-Полинга). Порядок связи по Чиословски-Миксону (nCM). Параметры, описывающие зависимость порядка связи от топологических характеристик электронной плотности в критических точках связи. Топологические характеристики связей в критических точках ковалентных связей молекул C2H6, C2H4 и C2H2. Распределение лапласиана электронной плотности в химических связях: неполярно-ковалентных (N2), полярно-ковалентных (NO), ионных (KF) и ван-дер-ваальсовых (Ar2). Характеристики атомных взаимодействий в терминах свойств электронной плотности и плотности кинетической энергии в критической точке связей. Топологические и энергетические характеристики связей различных типов.

Тема 7. Расчеты структур молекул с учетом эффектов среды.

Континуальные и дискретные модели учета эффектов растворителя. Результаты применения к расчетам структур молекул моделей диэлектрического континуума и реактивного поля Онзагера, методов самосогласованного реактивного поля (SCRF) и поляризуемого континуума (PCM).

Силовой и энергетический подходы к описанию химической связи в молекулах. Теоремы о силах. Теорема Гельмана-Фейнмана. Поверхность потенциальной энергии в приближении Борна-Оппенгеймера. Вторая теорема Эренфеста. Теорема вириала. Усредненный вириал плотности сил Эренфеста, действующих на электроны. Зависимости полной энергии E и силы Гельмана-Фейнмана F от межъядерного расстояния для молекулы водорода. Зависимости изменения полной энергии, кинетической и потенциальной энергии от межъядерного расстояния при образовании молекул с разными типами химической связи. Орбитальное описание химической связи. Приближение МО ЛКАО. Интерференция АО. Корреляционные диаграммы МО гомоядерных и гетероядерных двухатомных молекул. Электронные термы двухатомных молекул. Характеристики основного состояния некоторых гомо- и гетероядерных молекул. Анализ заселенности орбиталей. Анализ электронной заселенности по Малликену. Порядок связи между атомами A и B по индексу Вайберга-Майера WAB . Вклад в обменную энергию в приближении нулевого дифференциального перекрывания. Индекс эффективной валентности атома. Естественные орбитали - естественные АО ? естественные орбитальные заселенности. Пространственное распределение электронной плотности. Деформационная электронная плотность. Стандартная деформационная электронная плотность. Промолекула. Псевдоатом. Дырка Ферми (обменная дырка) ? описывает уменьшение вероятности нахождения электрона с данным спином в точке $r2$ относительно другого электрона с таким же спином в положении $r1$ (опорный электрон). Плотность дырки Ферми. Многатомные молекулы. Симметризованные (групповые) орбитали в разложении ЛКАО (на примере молекулы воды). Использование таблиц характеров неприводимых представлений точечных групп симметрии в методе ЛКАО.

Тема 8. Химическая связь в координационных соединениях.

Описание химической связи в теории кристаллического поля, теория поля лигандов и молекулярных орбиталей. Спектрохимический ряд. Комплексы сильного и слабого полей. Магнитные свойства комплексов. Энергия стабилизации кристаллическим полем. Эффект Яна-Теллера. Спин-кроссовер.

Теория кристаллического поля (ТКП). Оператор электростатического взаимодействия (возмущения КП). Расположение лигандов в октаэдрическом и тетраэдрическом комплексах и стандартная ориентация d-орбиталей. Расщепление уровней d-электронов в полях различной симметрии. Спектрохимический ряд. Распределение электронов в слабых и сильных полях лигандов симметрии Oh. Метод молекулярных орбиталей. Валентные орбитали 3d-металла и групповые орбитали лигандов, обеспечивающие σ -связи в комплексе ML6 симметрии Oh. Диаграмма энергетических уровней октаэдрического комплекса с σ -связями. Диаграмма энергетических уровней комплекса с π -связями, пример ? C6H6Cr(CO)3. Использование таблиц характеров неприводимых представлений точечных групп в методе MO-ЛКАО. Адиабатическое приближение. Матричный элемент ?оператора неадиабатичности?. Вид адиабатического потенциала в нормальных координатах (Qa). Уравнение гармонического осциллятора (для каждой нормальной координаты Qa). Симметризованные смещения ядер. Формы симметризованных смещений атомов в октаэдрических комплексах ML6: смещения типа A1g, типа Eg, (Q ε , Q θ), типа T2g (Q ξ), ? и их комбинации в случае вырождения. Формы симметризованных смещений атомов в тетраэдрических комплексах: смещения типа A1, типа E (Q ε), типа E (Q θ), типа T2 (Q ξ), типа T2? (Q ξ^*), ? и их комбинации в случае вырождения. Эффект и псевдоэффект Яна-Теллера. Электронно-колебательные уравнения при наличии электронного вырождения. Если хотя бы один матричный элемент Aa отличен от нуля, то адиабатический потенциал в точке Qa не имеет минимума. Теорема Яна-Теллера: для любой молекулярной системы с вырожденным электронным состоянием в нелинейной симметричной ядерной конфигурации Q0 всегда найдется деформация Qi, для которой не равен нулю первый интеграл в выражении для E(Qi). Эффект Яна-Теллера второго порядка. Типы искажений плоских D3h-структур молекул AX3, определяемые проявлением эффекта Яна-Теллера второго порядка. Проявление эффектов Яна-Теллера: первого порядка при пересечении адиабатических потенциалов, второго порядка (псевдоэффекта) при сближении адиабатических потенциалов. Полный адиабатический потенциал. Е-е задача: ?Мексиканская шляпа? (без учета квадратичных членов). Е-е задача: ?Мексиканская шляпа? (с учетом квадратичных членов). Орбитальное вырождение для конфигурации d9 (2Eg). Тетрагональное искажение комплекса, вызванное эффектом Яна-Теллера. Типы псевдо-ян-теллеровских дисторсий, обуславливающих конформационные превращения пентакоординационных соединений меди(II). Влияние псевдо-ян-теллеровских дисторсий на кривизну поверхности адиабатического потенциала и их значение для реакционной способности комплексов меди(II) и медьсодержащих белков Типа 1.

Тема 9. Электронная структура твердых тел.

Одноэлектронные волновые функции в кристаллах и методы их расчета. Приближение локальной плотности. Уровень Ферми. Плотность состояний. Зонная структура твердых тел. Ха-метод. Модель Гудинафа. Модель кластеров. Кооперативные эффекты Яна-Теллера и спиновые переходы в твердых телах.

Трансляционная симметрия с вектором трансляции \mathbf{T} и решетки Бравэ. Одноэлектронные волновые функции в кристаллах. Волновая функция свободного электрона ? бегущая волна. Волновое число свободного электрона ? любое. Кинетическая энергия свободного электрона. Волновые функции состояний электрона, движущегося в периодическом пространстве (с граничными условиями $\psi(0) = \psi(a) = 0$) ? стоячие волны. Волновое число электрона, движущегося в периодическом пространстве ? $k = ?(\pi/a)n$ ($n = 1, 2, 3, ?$). Энергия электрона, движущегося в периодическом пространстве. Профили распределения потенциальной энергии электрона и электронных волн ψ_1 и ψ_2 вдоль цепочки атомов с периодом a . Разность энергий волн ψ_1 и ψ_2 при $k_i = ?(\pi/a)n_i$ есть энергетическая щель (E_g). Функция Блоха при трехмерном периодическом потенциале $V(r) = V(r+a)$. Кристаллические орбитали. Схема формирования функции Блоха в одномерном кристалле. Одноэлектронные уравнения для бесконечного периодического кристалла. Обратное пространство ? пространство волновых векторов \mathbf{k} (k -пространство). Энергетические зоны в k -пространстве: зоны Бриллюэна, запрещенные зоны и приведенные зоны Бриллюэна. Первая зона Бриллюэна кубической гранецентрированной решетки. Уровень Ферми ? высший энергетический уровень, заполненный электронами в твердом теле при 0 К, его энергия - энергия Ферми. Поверхности Ферми в k -пространстве. Плотность состояний $g(E) = dN(E)/dE$. Общая структура энергетических зон. Структуры полос зон проводимости и валентных зон ГЦК-кристаллов Si и GaAs, Si ? полупроводник с непрямыми переходами, GaAs - полупроводник с прямыми переходами. Методы расчета волновых функций в кристаллах. Приближение сильной связи ? ЛКАО, методы Хартри-Фока и Кона-Шема. Приближение слабой связи ? метод Кона-Шема: 1) Метод плоских волн. 2) Метод ортогонализованных плоских волн (OPB - OPW). 3) Метод присоединенных плоских волн (PPB ? APW, MT-потенциал, ?muffin-tin potential?). 4) Линеаризованный метод присоединенных плоских волн (LAPW). 5) Полнопотенциальный линеаризованный метод присоединенных плоских волн (FP-LAPW). 6) Метод LAPW с локальными орбиталами (LAPW+LO, LAPW+lo). 7) Линейный метод MT-орбиталей (LMTO). 8) LMTO-приближение атомных сфер (LMTO-ASA). 9) Полнопотенциальный метод LMTO (FP-LMTO). 10) Метод LMTO с сильной связью (TB-LMTO). 11) Полнопотенциальный метод локализованных орбиталей (FPLO). 12) Метод псевдопотенциала. Основные приближения для гамильтониана, лежащие в основе неэмпирических методов решения одноэлектронных уравнений Кона-Шема и Хартри-Фока для структур с бесконечным периодическим потенциалом и способы аппроксимации базисных наборов. Схема заполнения электронами валентных зон и зон проводимости в различных веществах. Сверхпроводники, где реализуется электрон-фононное взаимодействие (куперовские пары: $+k\uparrow -k\downarrow$). Структура кристалла MgB₂ и вычисленное распределение электронной плотности в нем. Кластерные модели. Зонная структура кристалла La_{1.85}Sr_{0.15}CuO₄, рассчитанная кластерным методом. Ха-метод в расчетах структур твердых тел. Модель химической связи Гудинафа. Параметр переноса b . Концептуальная фазовая диаграмма T ? b . Кооперативный эффект Яна-Теллера. Гамильтониан ян-теллеровской системы. Модельные структуры несоразмерной и соразмерной фаз K₂Pb₃[Cu(NO₂)₆]. Примеры ян-теллеровских систем: редкоземельные цирконы ? TbVO₄, DyVO₄ (псевдо-эффект Яна-Теллера), шпинели AB₂O₄ (Е-шпинели, Т-шпинели), PrAlO₃. Переходы между спиновыми состояниями. Конфигурации с высокими- и низкоспиновыми состояниями в октаэдрическом поле: d₄, d₅, d₆, d₇. Гамильтонианы для переходов между высокими- и низкоспиновыми состояниями.

Тема 10. Квантово-химический анализ межмолекулярных взаимодействий

Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия. Донорно-акцепторные молекулярные комплексы. Специфические невалентные взаимодействия. Водородная связь. Супрамолекулярные структуры.

Метод супермолекулы. Линии связи в димерах бензола: Т-образном, параллельно-смещенном и сэндвичево-образном. Распределение электронной плотности и лапласиана электронной плотности в супермолекулах. Критерии Наканиши-Хаяши-Нарахара в методе супермолекулы. Энергия межмолекулярного взаимодействия. Суперпозиционная ошибка (basis set superposition error ? BSSE). Метод компенсации суперпозиционной ошибки (counterpoise correction ? CP). Методы теории возмущений. Взаимодействие постоянный диполь ? индуцированный диполь в газах, жидкостях и твердых телах. Формула Лондона для взаимодействия сферических молекул. Приближение парной аддитивности. Потенциал Леннард-Джонса. Электростатический потенциал. Донорно-акцепторные комплексы. Вклады различных составляющих в энергию образования комплексов. Водородная связь: X-H \cdots Y (X = C, N, O, F, P, S; Y = N, O, F, S, Cl). Строение димеров (HF)2 и (H2O)2 и распределение лапласиана электронной плотности в них. Характеристики слабой, промежуточной и сильной водородных связей O-H \cdots O. Электронные плотности отдельных молекул при геометрии, которую они имеют в димере воды, их суперпозиция и электронная плотность в димере воды. Электростатический потенциал в димере воды. Особые типы водородных связей: C-H \cdots π, X-H \cdots H-Y, [F-H-F]-. Приближенные характеристики различных водородных связей. Структура двойной спиралей ДНК, схема внутримолекулярных взаимодействий пар оснований и водородные связи, реализующие эти взаимодействия. Распределение электронной плотности, электростатического потенциала и вклады в энергию взаимодействия в комплексе гуанин-цитозин. Зависимости электронной плотности и лапласиана электронной плотности в критической точке связи H \cdots Y от длины водородной связи и ван-дер-ваальсовых взаимодействий, установленные по теоретической и экспериментальной электронной плотности для молекулярных кристаллов, построенных из ароматических молекул. Зависимости плотности электронной энергии ϵ_b и лапласиана электронной плотности для межмолекулярных водородных H \cdots F связей. Корреляция между плотностью кинетической энергии g_b и плотностью потенциальной энергии v_b в критических точках водородных связей и ван-дер-ваальсовых взаимодействий и их длинами, установленные по теоретической и экспериментальной электронной плотности для молекулярных кристаллов, построенных из ароматических молекул. Сравнение потенциала взаимодействия H \cdots O, U(r), с потенциалами Китайгородского UK(r), Морса UM(r) и Бэкингема-Хилла UB(r). Гибридные методы квантовая механика ? молекулярная механика. Внутренние (квантовые), внешние (классические) и граничные области. Аддитивные методы. Неаддитивные методы. Супрамолекулярные структуры. Континуальные и дискретные модели учета эффектов растворителя. Применение к расчетам структур молекул моделей диэлектрического континуума и реактивного поля Онзагера, методов самосогласованного реактивного поля (SCRF), поляризуемого континуума (PCM) и модели растворителя с эффективными потенциалами фрагментов (EFP).

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

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 5 апреля 2017 года №301)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-996н/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);

- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
- критерии оценивания для каждого оценочного средства;
- содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.

Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модулю).

7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы. Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;
- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС 3++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Basis Set Exchange - <https://bse.pnl.gov/bse/portal>

Firefly - <http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/>

Gaussian Website - <http://www.gaussian.com/>

поисковая система - www.google.ru

химическая связь - http://ru.wikiversity.org/wiki/Химическая_связь

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Методические указания по подготовке к устным опросам:

При самостоятельной работе по подготовке к устному опросу необходимо ознакомиться с темой и списком вопросов по теме. Повторите лекционный материал по теме, отметьте 'проблемные' точки. Определите необходимую литературу из рекомендованной к курсу, можно воспользоваться интернет-источниками. При работе с источниками, учебниками и методическими пособиями, выполняйте общие рекомендации по самостоятельной работе. Сформируйте тезисный список ответов на вопросы, со своими замечаниями и комментариями. Студент должен быть готов ответить на поставленные вопросы, аргументировать свой вариант ответа, ответить на дополнительные и уточняющие вопросы преподавателя. После окончания опроса оценить степень правильности своих ответов, уяснить суть замечаний и комментариев преподавателя.

Методические указания по выполнению контрольных работ:

При подготовке к контрольной работе следует повторно разобрать задания, которые были разобраны на семинарских занятиях и выполнены самостоятельно.

- контрольную работу следует выполнять полностью, т.е. решить все задачи и ответить на все вопросы задания; непонятный вопрос или задачу не следует пропускать; в этом случае необходимо обратиться за помощью к преподавателю;
- ответы в контрольных работах излагать ясно, точно и полно, таким образом, чтобы преподавателю был ясен весь ход рассуждений;
- при выполнении расчётов необходимо внимательно относиться к единицам измерения всех величин, входящих в ту или иную формулу, и проверять, в каких единицах измерения должен быть результат;
- контрольная работа выполняется на листах формата А4;

- не допускаются перечёркивания, вставки, произвольное сокращение слов и каких - либо обозначений, не применяемых в литературе по изучаемой дисциплине;
- неудовлетворительное оформление контрольной работы может быть причиной её незачёта; небрежность письма и грамматические ошибки недопустимы;
- контрольная работа должна быть выполнена студентом самостоятельно; при выполнении контрольной работы не допускается использовать мобильные устройства;
- на каждой странице работы необходимо оставлять поля;
- в шапке контрольной работы необходимо написать фамилию, инициалы, группу, направление, курс, наименование дисциплины, номер контрольного задания;
- время, отведенное на выполнение контрольной работы, определяется преподавателем. По окончании отведенного на выполнение контрольной работы времени контрольная работа сдается преподавателю для проверки.

Методические указания по подготовке к зачету:

Подготовка к зачету способствует закреплению, углублению и обобщению знаний, получаемых, в процессе обучения, а также применению их к решению практических задач. Готовясь к зачету, студент ликвидирует имеющиеся пробелы в знаниях, углубляет, систематизирует и упорядочивает свои знания. На зачете студент демонстрирует то, что он приобрел в процессе обучения по конкретной учебной дисциплине. При подготовке к зачету необходимо ознакомиться списком вопросов к зачету, повторно ознакомится с лекционным материалом, систематизировать информацию по курсу. Особое внимание следует уделить разделам курса, изученным самостоятельно и вызывавшим наибольшие затруднение при теоретическом изучении и решении практических задач.

Для успешного освоения любой дисциплины необходима творческая, планомерная, повседневная работа, которая доставляет радость открытия нового и эстетическое наслаждение от глубокого проникновения в познание Истины, Гармонии и Красоты нашего удивительного мира, в котором царят законы, порождающие Порядок из Хаоса. 'Не то, что мните вы, природа: не слепок, не бездушный лик - в ней есть душа, в ней есть свобода, в ней есть любовь, в ней есть языки?' (Федор Тютчев).

Во время практических и самостоятельных работ необходимо постоянно углублять свои представления об основных понятиях, концепциях, принципах и законах природы, которые были предметом рассмотрения на соответствующих лекционных занятиях. Перед началом каждого практического занятия полезно еще раз просмотреть рабочую программу и спросить себя, в какой мере Вы уже сумели достичь сформулированных в ней целей и решить поставленные задачи курса. Если ответ на этот вопрос Вас не удовлетворит, повторите, пожалуйста, пройденный материал по конспектам лекций и их презентациям. Если же этого окажется недостаточным, обратитесь к рекомендованной литературе, а при необходимости сформулируйте проблемные вопросы и попросите помочь преподавателя на консультации или ближайшей лекции. Обязательно находите время для повторения пройденного материала, проверяя свои знания и навыки по контрольным вопросам к практическим и самостоятельным занятиям. Не забывайте простую истину: 'повторение - мать учения'. Очень важно научиться гармонично переключать внимание во время продолжительной работы. Это высокое искусство постигается не сразу, и Вы должны ему постоянно обучаться. С этой целью через каждые 40 минут лекционных и практических занятий мы на 3-4 минуты переключаемся на вопросы, представляющие эстетическую и нравственную ценность, или приводим исторические и биографические сведения, активизируя тем самым образное мышление и давая кратковременный отдых тем отделам мозга, который испытывали большую нагрузку при абстрактном мышлении. Поступайте так же и при выполнении самостоятельных работ. Если Вы будете следовать этим простым рекомендациям и, кроме того, иметь полноценный сон, Вы никогда не устанете, но всегда будете пребывать в состоянии душевного подъема, любви ко всему живому, радости жизни и преуспеете во всех делах, а не только в освоении данного курса.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

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

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Компьютерный класс.

12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи:
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 04.04.01 "Химия" и магистерской программе "Нефтехимия и катализ".

Приложение 2
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.Б.4 Современные теории химической связи

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Нефтехимия и катализ

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

Основная литература:

1. Кочелаев, Борис Иванович (д-р физ.-мат. наук ; 1934-) . Квантовая теория : конспект лекций / Б. И. Кочелаев ; Казан. федер. ун-т, Ин-т физики, Каф теорет. физики . - [2-е изд., перераб., доп. и испр.] . - Казань : [Казанский университет], 2013 . - 222 с.
2. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для вузов [Электронный ресурс] : учеб. пособие - Электрон. дан. - Москва : Издательство 'Лаборатория знаний', 2017. - 522 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94104>
3. Хемоинформатика и молекулярное моделирование: дистанционный курс для студентов бакалавриата и магистратуры направления подготовки: 020100 'Химия' [Электронный образовательный ресурс]/Химический институт им. А.М. Бутлерова, кафедра органической химии/ Маджидов Т.И. - Казань: Казанский федеральный университет, 2013. - URL: <http://zilant.kpfu.ru/course/view.php?id=376>
4. Реутов, О.А. Органическая химия. В 4 ч. Часть 1 [Электронный ресурс] : учеб. / О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин. - Электрон. дан. - Москва : Издательство 'Лаборатория знаний', 2017. - 570 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94167>

Дополнительная литература:

1. Майер И., Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул [Электронный ресурс] : учеб. пособие - Электрон. дан. - Москва : Издательство 'Лаборатория знаний', 2017. - 387 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94102>
2. Тоуб, М. Механизмы неорганических реакций [Электронный ресурс] : монография / М. Тоуб, Д. Берджесс. - Электрон. дан. - Москва : Издательство 'Лаборатория знаний', 2017. - 683 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94114>
3. Сироткин О. С. Эволюция теории химического строения вещества А.М. Бутлерова в унитарную теорию строен. химич. соед. (осн. един. химии): Монография / О.С. Сироткин. - М.: НИЦ ИНФРА-М, 2013 - 247с.: 60x88 1/16. - (Научная мысль). - URL: <http://znanium.com/bookread2.php?book=420415>
4. Лорд, Э.Э. Новая геометрия для новых материалов. [Электронный ресурс] / Э.Э. Лорд, А.Л. Маккей, С. Ранганатан. - Электрон. дан. - М. : Физматлит, 2010. - 260 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/48204>

Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.Б.4 Современные теории химической связи

Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Нефтехимия и катализ

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, учебно-методические комплексы, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования (ФГОС ВО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.