

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



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Д.А. Таюрский

» _____ 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Основы квантовой химии

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

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-2	владением современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации (ОПК-2);

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

- основные современные методы квантовой химии (неэмпирические и полуэмпирические методы, теорию функционала плотности),
- иметь представления о приближениях и допущениях, использованных при разработке этих методов,
- иметь представления об ограничениях и возможностях разных методов для моделирования электронной структуры и химических реакций

Должен уметь:

- определять необходимую информацию для расчета электронной структуры молекул и анализировать данные расчетов;
- ориентироваться в обширной литературе, использующей данные квантово-химических расчетов

Должен владеть:

- квантово-химических расчетов физико-химических характеристик веществ;
- квантово-химического моделирования химических реакций

Должен демонстрировать способность и готовность:

распоряжаться теоретическими знаниями о современных представлениях квантовой химии, о методах расчета пространственной и электронной структуры молекул, а также приобретение умений и навыков работы с комплексами квантово-химических программ

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ОД.2 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.04.01 "Химия (Нефтехимия и катализ)" и относится к обязательным дисциплинам. Осваивается на 1 курсе в 1 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 3 зачетных(ые) единиц(ы) на 108 часа(ов).

Контактная работа - 42 часа(ов), в том числе лекции - 20 часа(ов), практические занятия - 22 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 66 часа(ов).

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

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет в 1 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. Принцип суперпозиции состояний	1	2	2	0	6
2.	Тема 2. Квантово-механическое описание молекулы	1	2	2	0	6
3.	Тема 3. Метод Хартри-Фока	1	2	2	0	6
4.	Тема 4. Учет электронной корреляции	1	2	2	0	6
5.	Тема 5. Основы метода функционала плотности	1	2	2	0	6
6.	Тема 6. Учет влияния среды	1	2	2	0	8
7.	Тема 7. Топологический анализ распределения электронной плотности	1	2	2	0	6
8.	Тема 8. Полуэмпирические методы квантовой химии	1	2	3	0	8
9.	Тема 9. Квантово-химические расчеты физических характеристик	1	2	2	0	6
10.	Тема 10. Применение методов квантовой химии для моделирования органической реакции	1	2	3	0	8
	Итого		20	22	0	66

4.2 Содержание дисциплины (модуля)

Тема 1. Принцип суперпозиции состояний

Принцип суперпозиции состояний. Принцип неопределенности. Линейные операторы. Собственные векторы и собственные значения эрмитова оператора. Существование волновой функции, измеряемые величины, средние значения физических величин.

Принцип неопределенности играет большую эвристическую роль, так как многие результаты задач, рассматриваемых в квантовой механике, могут быть получены и поняты на основе комбинации законов классической механики и принципа неопределенности.

Полное описание состояния физической системы в классической механике осуществляется заданием в данный момент времени всех ее координат и скоростей; по этим начальным данным уравнения движения полностью определяют поведение системы во все будущие моменты времени. В квантовой механике такое описание принципиально невозможно, поскольку координаты и соответствующие им скорости не существуют одновременно. Таким образом, описание состояния квантовой системы осуществляется меньшим числом величин, чем в классической механике, т.е. является менее подробным, чем классическое.

Волновая функция? величина, полностью описывающая состояние мик-рообъекта(электрона, протона, атома, молекулы) и вообще любой квантовой системы.

Таким образом, волновая функция является функцией состояния квантовой системы. Описание состояния с помощью волновой функции имеет статистический, т.е. вероятностный, характер: квадрат модуля волновой функции дает значение вероятностей тех величин, от которых зависит волновая функция. Совокупность вероятностей нахождения частицы в некоторой конечной области пространства называется плотностью вероятности. Волновая функция описывает не только распределение вероятностей нахождения микрообъекта в пространстве, но и позволяет получить максимально полную, совместимую с принципами квантовой механики информацию о любых физических величинах, характеризующих эти микрообъекты.

Операторы.

Приближение Борна-Оппенгеймера

Тема 2. Квантово-механическое описание молекулы

Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Решение задачи о состояниях одноэлектронного атома. Угловая и радиальная задачи: сферические и радиальные функции; орбитали s-, p-, d- типа; радиальные функции распределения электронной плотности. Приближение Борна-Оппенгеймера. Электронные и ядерные функции.

Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Решение задачи о состояниях одноэлектронного атома. Угловая и радиальная задачи: сферические и радиальные функции; орбитали s-, p-, d- типа; радиальные функции распределения электронной плотности. Приближение Борна-Оппенгеймера. Электронные и ядерные функции.

Наиболее удобным методом описания электронного строения атома оказалось решение волнового уравнения Шрёдингера. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Уравнение Шрёдингера

Волновое уравнение было предложено в 1926 г. немецким физиком Э. Шрёдингером (1887-1961) для описания состояния электрона в атоме водорода. Он объединил математические выражения для колебательных процессов и уравнение де Бройля

Решениями уравнения Шрёдингера являются волновые функции. Для одноэлектронной системы (атома водорода) выражение для потенциальной энергии электрона имеет простой вид:

$$E_p = -e^2 / r$$

Чтобы решить волновое уравнение, надо разделить его переменные. Для этого заменяют декартовы координаты x, y, z на сферические r, θ, φ . Тогда волновую функцию можно представить в виде произведения трех функций, каждая из которых содержит только одну переменную:

$$\psi(x,y,z) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\varphi)$$

Функцию $R(r)$ называют радиальной составляющей волновой функции, а $\Theta(\theta) \Phi(\varphi)$ - ее угловыми составляющими.

В ходе решения волнового уравнения вводятся целые числа - так называемые квантовые числа (главное n , орбитальное l и магнитное m_l). Функция $R(r)$ зависит от n и l , функция $\Theta(\theta)$ - от l и m_l , функция $\Phi(\varphi)$ - от m_l .

Геометрическим образом одноэлектронной волновой функции является атомная орбиталь. Она представляет собой область пространства вокруг ядра атома, в которой высока вероятность обнаружения электрона (обычно выбирают значение вероятности 90-95%). Это слово происходит от латинского "орбита" (путь, колея), но имеет другой смысл, не совпадающий с понятием траектории (пути) электрона вокруг атома, предложенным Н. Бором для планетарной модели атома. Контур атомной орбитали - это графическое отображение волновой функции, полученной при решении волнового уравнения для одного электрона.

Совокупность состояний электрона в атоме с одним и тем же значением n называют энергетическим уровнем. Число уровней, на которых находятся электроны в основном состоянии атома, совпадает с номером периода, в котором располагается элемент. Номера этих уровней обозначают цифрами: 1, 2, 3,... (реже - буквами K, L, M, ...).

Энергетический подуровень - совокупность энергетических состояний электрона в атоме, характеризующихся одними и теми же значениями квантовых чисел n и l . Подуровни обозначают буквами: s, p, d, f... Первый энергетический уровень имеет один подуровень, второй - два подуровня, третий - три подуровня и так далее.

Если на схеме орбитали обозначить в виде ячеек (квадратных рамок), а электроны - в виде стрелок (\uparrow или \downarrow), то можно увидеть, что главное квантовое число характеризуют энергетический уровень (ЭУ), совокупность главного и орбитального квантовых чисел - энергетический подуровень (ЭПУ), совокупность главного, орбитального и магнитного квантовых чисел - атомную орбиталь, а все четыре квантовые числа - электрон.

Тема 3. Метод Хартри-Фока

Фокиан, кулоновские и обменные операторы. Канонические уравнения Хартри-Фока и канонические орбитали. Ограниченный и неограниченный варианты метода Хартри-Фока. Приближение МО ЛКАО.

Используя вариационный принцип и правила Слейтера, можно вывести уравнения для нахождения волновых функций, удовлетворяющих стационарному электронному нерелятивистскому уравнению Шредингера.

При их выводе в данном разделе используется математический аппарат курса вариационного исчисления. Некоторые сведения из этого курса, необходимые для понимания дальнейшего изложения, приведены в Приложении 1.

Выражение есть функционал, для которого требуется найти экстремум с дополнительными условиями ортонормированности. Ошибка! Источник ссылки не найден.. Экстремаль этой задачи, т.е. функция, обеспечивающая экстремум функционала, в соответствии с вариационным принципом, очевидно, и будет искомой волновой функцией, соответствующей точному решению уравнения. Ошибка! Источник ссылки не найден. для основного состояния молекулы.

Для нахождения условного экстремума функционала с условиями применим метод множителей Лагранжа: образуем вспомогательный функционал F с (неизвестными пока) постоянными λ

Неограниченный метод Хартри-Фока

Метод Хартри-Фока, рассмотренный в разделе 2.5, дает хорошее начальное приближение многоэлектронной волновой функции. Его точность в большинстве случаев вполне достаточна для получения полуквантитативных результатов о структуре и относительной стабильности молекул, а также для использования в качестве референсной конфигурации при оценке корреляционной энергии. Однако рассмотренный вариант метода имеет очень важный недостаток. Вся теория, изложенная в разделе 2.5 базировалась на предположении о дважды занятых орбиталях, т.е. на предположении, что в молекуле четное число электронов, и любые два электрона с противоположными спинами занимают одну и ту же пространственную орбиталь. Такие системы называются системами с замкнутыми (закрытыми) электронными оболочками, в отличие от систем, которые имеют неспаренные электроны и называются системами с открытыми (незамкнутыми) оболочками. В химии системы с открытыми оболочками встречаются достаточно часто. Примерами являются радикалы (один неспаренный электрон), триплетные и синглетные возбужденные состояния молекул (два неспаренных электрона), многие органические и неорганические комплексы переходных металлов (несколько неспаренных электронов, заселяющих вырожденные d - или f -орбитали), изолированные атомы с незаполненными оболочками. Описание таких систем по теории, изложенной в разделе 2.5, принципиально неправильно и эта теория должна быть распространена на случаи открытооболочечных систем.

Один из наиболее простых и естественных путей решения этой задачи - рассмотрение детерминантных функций, построенных из одноэлектронных спин-орбиталей, т.е. функций, каждая из которых описывает состояние только одного электрона с данным спином, без какого-либо принудительного спаривания (т.н. принцип РОПС?: разные орбитали для разных спинов).

Тема 4. Учет электронной корреляции

Вариационный метод: метод конфигурационного взаимодействия (КВ); варианты КВ1, КВ1+2 и полное КВ.

Разложение волновой функции N -электронной молекулы по N -электронным антисимметричным волновым функциям является ясным и естественным приемом. В методе конфигурационного взаимодействия (КВ или CI), много-электронная волновая функция раскладывается по детерминантам Слейтера, описывающим систему во всех возможных электронных конфигурациях, учитывающих возможные возбуждения электрона с занятой на различные незанятые (виртуальные) орбитали Хартри-Фока. Это означает, что каждый такой детерминант строится из спин-орбиталей, отвечающих основному или одному из возбужденных одноэлектронных состояний. Полная КВ волновая функция, учитывающая все возможные электронные возбуждения

При этом спин-орбитали в каждом слейтеровском детерминанте остаются неизменными, что предполагает их предварительный расчет по методу ХФ, а варьируются коэффициенты a_k . Полный метод КВ может дать, в принципе, точное решение электронного уравнения Шредингера в пределах данного базисного набора, но это реализуемо только для маленьких молекул, использующих не слишком большой базис: даже в этом случае число возбужденных конфигураций очень велико. Для больших молекул и базисов MV - разложение на практике ограничено: в него включают конфигурации, отвечающие возбуждению лишь некоторого числа электронов. Наиболее часто используется учет однократно- и двукратно возбужденных электронных конфигураций, что уже позволяет учесть около 95% корреляционной энергии, понижая энергию системы на 2-3 эВ. Это позволяет, в частности, получить правильное описание процесса диссоциации молекулы F_2

Тема 5. Основы метода функционала плотности

Основы метода функционала плотности. Теорема Хоэнберга-Кона и функционал энергии. Уравнения Кона-Шэма.

Функция - это соответствие одного числового ряда другому, т.е. функция f берет число x и возвращает сопоставленное ему число: $y = f(x)$. Функционал же ставит в соответствие число и функцию,

которая, в свою очередь, сопоставлена другому числу, т.е. $y = F[f(x)]$ или просто $y = Ff$. С функционалом можно проводить те же операции, что и с функцией

В течение многих лет использование электронной плотности для описания квантовой системы было скорее интуитивным, чем строго обоснованным. Электронная плотность гораздо более привлекательна, чем волновая функция. Во-первых, она физически определена и, в принципе, измерима в отличие от волновой функции, не имеющей физического смысла. Во-вторых, волновая функция N -электронной системы зависит от $3N$ координат электронов (или даже $4N$, если принимать во внимание спин), тогда как электронная плотность всегда есть функция от трех координат независимо от числа электронов в молекуле. Проблема заключается в том, что было неизвестно, существует ли взаимозависимость между электронной плотностью и энергией, и если она существует, каков ее конкретный вид.

Теорема Хоэнберга и Кона.

В 1964 году Хоэнберг и Кон доказали теорему, что свойства основного состояния являются функционалом электронной плотности ρ , что явилось вторым рождением DFT. Конкретнее говоря, согласно теореме Хоэнберга и Кона энергия основного состояния молекулы является функционалом электронной плотности $E_{\text{total}}[\rho]$, и энергия минимальна, если ρ является точной электронной плотностью основного состояния.

Эта теорема доказывается с использованием принципа "от обратного?". Рассмотрим следующую цепочку логических рассуждений.

Тема 6. Учет влияния среды

Модель диэлектрического континуума. Реактивное поле Онзагера. Понятие виртуальной полости, окружающей молекулу в среде.

Теория Онзагера удовлетворительно объясняет экспериментальные данные по измерению диэлектрической проницаемости полярных жидкостей в широком интервале температур, но для сильно полярных жидкостей дает заниженные значения ϵ . Например, для воды предсказывается $\epsilon = 31$, тогда как на опыте $\epsilon = 78,2$.

Модель Онзагера обладает следующими недостатками:

- молекула упрощенно представляется сферой радиуса a ;
- окружение выделенной молекулы принимается непрерывным и изотропным;
- диполь представляется точечным и помещенным в центр сферы, что явно не справедливо для любой полярной молекулы, в которой распределение зарядов носит сложный характер.

Тема 7. Топологический анализ распределения электронной плотности

Теория. Атомы в молекулах. Критические точки. Лапласиан электронной плотности.

Тема 8. Полуэмпирические методы квантовой химии

Приближение нулевого дифференциального перекрытия. Полное пренебрежение дифференциальным перекрытием (CNDO). Частичное пренебрежение дифференциальным перекрытием (INDO).

Приближение нулевого дифференциального перекрытия. Полное пренебрежение дифференциальным перекрытием (CNDO). Частичное пренебрежение дифференциальным перекрытием (INDO).

полуэмпирические методы являются методами валентного приближения, т.е. в отличие от неэмпирических методов они учитывают только валентные электроны на АО валентных оболочек. Влияние невалентных (остовных) электронов неявно учитывается в эмпирических параметрах.

Необходимо четко отдавать себе отчет в том, что результаты полуэмпирических расчетов не могут передавать достаточно точно одновременно все физические и химические свойства молекул. Во-первых, упрощение теории неизбежно приводит к закруглению результатов расчетов, во-вторых, подгонка параметров производится по одному, реже по нескольким свойствам. В связи с этим возникают различные параметризации методов, призванные удовлетворительно описывать определенное свойство или группу свойств.

Упрощенные теоретические модели должны удовлетворять следующим основным требованиям:

Полуэмпирические методы должны быть достаточно просты, чтобы их можно было применять для расчета больших молекул.

- Они должны с помощью параметризации компенсировать недостатки метода Хартри-Фока (электронную корреляцию, энергию нулевых колебаний).
- Результаты расчетов должны быть инвариантны по отношению к ортогональным преобразованиям АО. Это означает, что такие величины как энталпия образования, дипольный момент, электронное распределение и т.д. не должны зависеть от поворота молекулы как целого в пространстве.

Тема 9. Квантово-химические расчеты физических характеристик

Выбор адекватного расчетного приближения. Расчеты магнитно-резонансных параметров

В output файле указываются значения констант для каждого атома в молекуле, для атома углерода это значение равно 199.1 ppm. Обычно константы экранирования, полученные экспериментально, указываются относительно стандартного образца, чаще всего им служит тетраметил-силан (ТМС). Таким образом, чтобы сравнить предсказанные значения с экспериментальными результатами, необходимо знать абсолютное значение экранирования для тетраметилсилана, используя точно такую же расчетную модель.

Чтобы рассчитать величину химического сдвига для атома С в метане, необходимо вычесть его абсолютное значение из величины сдвига стандарта. В нашем случае это значение равно - 3.9 ppm, что достаточно хорошо согласуется с экспериментальным значением -7.0 ppm. Отрицательное значение величины сдвига говорит о том, что экранирование соответствующего атома в исследуемой молекуле больше, чем в молекуле стандарта (т.е. в молекуле тетраметилсилана), положительное же число указывает на обратное.

Параметры ЯМР магнитного экранирования для атомов, подобных углероду, зависят от типа соседних атомов, связанных с ними, и типа связей. Используя внутренние атомы С молекулы бутана в качестве точки отсчета, вычислите константы экранирования ^{13}C для бутана-2 и бутана-1.

Тема 10. Применение методов квантовой химии для моделирования органической реакции

Применение методов квантовой химии для моделирования органической реакции. Понятие поверхности потенциальной энергии и координаты реакции

Поверхность потенциальной энергии.

Определение ППЭ.

Итак, мы рассмотрели различные методы, позволяющие решить электронную часть волнового уравнения Шредингера для молекулы используя приближение Борна-Оппенгеймера. В рамках этого приближения положение ядер считается фиксированным, этому положению всегда соответствует оператор Гамильтона $H(r, R)$, характеризующийся собственной функцией - электронной волновой функцией $\Psi_e(r, R)$ и собственным значением - полной энергией E_{total} данной системы.

Однако в реальной ситуации происходит непрерывное изменение относительных координат ядер: протекание химической реакции, конформационные переходы, наконец, просто колебания атомов в молекуле относительно равновесного межатомного расстояния. Чтобы описать эти явления, очевидно, необходимо многократно решить электронное волновое уравнение с изменяющимся набором координат ядер q_1, q_2, \dots, q_N . В результате, мы найдем некоторую функцию E_{total} , представляющую собой потенциальную энергию молекулярной системы за вычетом кинетической энергии ядер, $E(q) = E(q_1, q_2, \dots, q_N)$, N - число атомов в молекуле. Эта функция называется поверхностью потенциальной энергии (ППЭ) системы.

В качестве координат q_i , в принципе, можно выбрать любой ряд геометрических параметров молекулы или их комбинаций. Однако, в большинстве случаев наиболее наглядны и удобны внутренние координаты молекулы: длины связей, валентные и торсионные углы. Общее число независимых внутренних геометрических координат молекулы равно $3N - 6$, для линейной молекулы $3N - 5$.

ППЭ двухатомной молекулы.

В простейшем случае двухатомной молекулы ($N = 2$, молекула линейна, $3N - 5 = J$) единственной естественной координатой является межатомное расстояние. ППЭ в данном случае представляет собой просто одномерную кривую.

Эта кривая, изображенная на рисунке, может быть двух основных типов: а) кривая с минимумом;

б) кривая без минимума.

В первом случае, в интервале $r_e < r < \infty$ энергетическая кривая имеет так называемый аттрактивный характер (энергия уменьшается при сближении атомов), т.е. описывает притяжение атомов. Точке r_e соответствует минимум энергии, и эта точка отвечает устойчивой геометрической конфигурации молекулы. На участке $0 < r < r_e$ кривая имеет репульсивный характер, энергия возрастает при сближении атомов. На бесконечном расстоянии атомов друг от друга энергия системы равна сумме полных энергий отдельных атомов

разность E_{total} при $r = r_e$ и $r = \infty$ дает энергию диссоциации связи D_e . Функция потенциальной энергии двухатомной молекулы для случая а) отвечает эмпирическому уравнению Морзе/

Оптимизация равновесной геометрии молекулы.

В подавляющем большинстве случаев на ППЭ молекулы существует несколько минимумов, отвечающих устойчивым молекулярным структурам. Самый глубокий (глобальный) минимум характеризует термодинамически наиболее устойчивую форму. Остальным (локальным) минимумам соответствуют энергетически более богатые изомеры. Все остальные точки на ППЭ соответствуют неустойчивым геометрическим конфигурациям молекулярной системы. В отсутствие внешних сил молекулярная система самопроизвольно релаксирует из такого состояния к геометрической конфигурации ближайшего минимума ППЭ. Неустойчивые состояния можно уподобить шарикам, находящимся на склоне потенциальной ямы

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 №14-55-996ин/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 планируемому результату 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)

База данных NIST Chemistry WebBook - <http://webbook.nist.gov/chemistry>

База данных Spectral Database for Organic Compounds (SDBS) - <http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs>

База данных результатов квантовохимических расчетов Computed Property Data Base for Molecules (CPDB) - http://riodb.ibase.aist.go.jp/cpdb/index_e.html

База данных химических сдвигов NmrShiftDB2 - <http://nmrshiftdb.nmr.uni-koeln.de>

Программа Firefly - <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>

Электронный образовательный ресурс Хемоинформатика и молекулярное моделирование площадки - <http://zilant.kfu-elearning.ru/course/view.php?id=376>

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

Вид работ	Методические рекомендации
лекции	В ходе лекционных занятий вести конспектирование учебного материала. Обращать внимание на категории, формулировки, раскрывающие содержание тех или иных явлений и процессов, научные выводы и практические рекомендации, положительный опыт в ораторском искусстве. Желательно оставить в рабочих конспектах поля, на которых делать пометки из рекомендованной литературы, дополняющие материал прослушанной лекции, а также подчеркивающие особую важность тех или иных теоретических положений. Задавать преподавателю уточняющие вопросы с целью уяснения теоретических положений, разрешения спорных ситуаций.
практические занятия	По результатам каждого практического занятия должны оформляться отчеты. Отчет должен соответствовать следующим требованиям: 1. Отчет по лабораторной работе должен содержать следующие разделы: а. Дата выполнения лабораторной работы б. Название лабораторной работы с. Цель лабораторной работы d. Задачи лабораторной работы e. Материалы, использованные для выполнения лабораторной работы (программы, исходные файлы) f. Поэтапное изложение процедуры (этап 1, этап 2) g. Результаты работы (+ таблицы, графики, иллюстрации, если требуются) h. Выводы 2. При написании отчета по лабораторной работе должен быть использован научный стиль речи (https://ru.wikipedia.org/wiki/Научный_стиль). 3. Выводы должны соответствовать заявленным цели и задачам работы, а также полученным результатам. 4. Цель и задачи должны быть сформулированы четко, ясно, лаконично и соответствовать теме (названию) работы. 5. Этапы работы должны быть представлены полностью, сформулированы четко, ясно, лаконично. 6. Результаты должны быть представлены полностью, сформулированы понятно, четко, ясно, лаконично, если необходимо, с использованием иллюстративных материалов (не забываем про нумерацию рисунков и таблиц и подписи к ним!).
самостоятельная работа	Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает: <ul style="list-style-type: none"> - чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины; - подготовку к практическим занятиям, устным опросам и контрольной работе; - работу с Интернет-источниками; - подготовку к сдаче практических работ, защите практической работы, сдаче экзамена, выполнение домашнего задания. Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение настоящей дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в рабочей программе дисциплины. По каждой из тем для самостоятельного изучения, приведенных в рабочей программе дисциплины, следует сначала прочитать рекомендованную литературу и при необходимости составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания и являющихся основополагающими в этой теме и для освоения последующих разделов курса.
зачет	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 ознакомиться с лекционным материалом, систематизировать информацию по курсу. Особое внимание следует уделить разделам курса, изученным самостоятельно и вызывавшим наибольшее затруднение при теоретическом изучении и решении практических задач.

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.

Мультимедийная аудитория.

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".

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. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. [Электронный ресурс] - Электрон. дан. - М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2014. - 522 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/66357>
2. Каплан И.Г., Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы. [Электронный ресурс] - Электрон. дан. - М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2014. - 397 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/66358>
3. Майер, И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул. [Электронный ресурс] - Электрон. дан. - М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2014. - 383 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/50535>
4. 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.

Дополнительная литература:

1. Шпольский, Э.В. Атомная физика. Том 2. Основы квантовой механики и строение электронной оболочки атома. [Электронный ресурс] - Электрон. дан. - СПб. : Лань, 2010. - 448 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/443>
2. Введение в хемоинформатику : учебное пособие / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек. - Казань : [Казанский университет], 2013. [Ч. 1]: Компьютерное представление химических структур. - 2013. - 173 с.
3. Введение в хемоинформатику : учебное пособие / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек. - Казань : [Казанский университет], 2013. Ч. 2: Химические базы данных / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, А. А. Варнек ; Казан. федер. ун-т. - Казань : [Издательство Казанского университета], 2015. - 185 с.
4. Введение в хемоинформатику : учебное пособие / Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, И. С. Антипин, А. А. Варнек. - Казань : [Казанский университет], 2013. Ч. 3: Моделирование 'структура-свойство' / И. И. Баскин, Т. И. Маджидов, А. А. Варнек ; Казан. федер. ун-т. ? Казань : [Издательство Казанского университета], 2015. - 302 с.
5. Ибрагимов, И.М. Основы компьютерного моделирования наносистем. [Электронный ресурс] / И.М. Ибрагимов, А.Н. Ковшов, Ю.Ф. Назаров. - Электрон. дан. - СПб. : Лань, 2010. - 384 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/156>

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.