

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное учреждение  
высшего профессионального образования  
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"  
Институт физики



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Таюрский Д.А.



\_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

*подписано электронно-цифровой подписью*

### Программа дисциплины

Моделирование молекулярных процессов в химических реакциях БЗ.ДВ.9

Направление подготовки: 011200.62 - Физика

Профиль подготовки: не предусмотрено

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Аминова Р.М.

**Рецензент(ы):**

Аганов А.В. , Салихов К.М.

### **СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой: Савостина Л. И.

Протокол заседания кафедры No \_\_\_\_ от " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Учебно-методическая комиссия Института физики:

Протокол заседания УМК No \_\_\_\_ от " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Регистрационный No 6131217

Казань  
2017

## Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) профессор, д.н. (профессор) Аминова Р.М. Кафедра физики молекулярных систем Отделение физики, Roza.Aminova@kpfu.ru

### 1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины "Моделирование молекулярных процессов в химических реакциях" является овладение квантовохимическими методами моделирования структуры молекулярных систем разной степени сложности, овладение методами оптимизации пространственной структуры молекулы в газовой фазе, а также с учетом среды (в жидкостях) и динамических изменений в зависимости от времени. Применение этих методов позволяет получать информацию о механизмах физико-химических процессов на поверхностях потенциальной энергии и проводить корректную интерпретацию экспериментальных данных в оптической и ЯМР спектроскопии.

### 2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел "Б3.ДВ.9 Профессиональный" основной образовательной программы 011200.62 Физика и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 4 курсе, 8 семестр.

Дисциплина Б3.ДВ9 "Моделирование молекулярных процессов в химических реакциях" входит в базовую часть профессионального цикла Б3 в раздел

Дисциплины по выбору "блок Б3.ДВ9) бакалавров по направлению 011200.62 - "Физика".

Изучение данной дисциплины базируется на подготовке студентов по квантовой механике в рамках Государственного стандарта общего образования, дисциплин подготовки бакалавров по направлению 011200.62 - "Физика": Б3.Б.10 "Квантовая теория", Овладение навыками использования современных квантовохимических методов для изучения структуры и свойств молекулярных систем с целью понимания закономерностей молекулярных процессов в химической физике позволит в дальнейшем успешно реализовать себя в профессиональной деятельности в области нанопотоники, оптики, в медицинской и биологической науках.

### 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин;
ПК-2 (профессиональные компетенции)	способностью проводить научные исследования в избранной области экспериментальных и (или) теоретических физических исследований с помощью современной приборной базы (в том числе сложного физического оборудования) и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта;
ПК-4 (профессиональные компетенции)	способностью применять на практике профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин;
ПК-5 (профессиональные компетенции)	способностью пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации в избранной области физических исследований;
ПК-6 (профессиональные компетенции)	способностью понимать и использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований;

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, включая знания о предмете и объектах изучения, методах исследования, современных концепциях, достижениях и ограничениях естественных наук (прежде всего химии, биологии, экологии, наук о земле и человеке);
ОПК-2 (профессиональные компетенции)	способностью использовать в профессиональной деятельности базовые знания фундаментальных разделов математики, создавать математические модели типовых профессиональных задач и интерпретировать полученные результаты с учетом границ применимости моделей;
ОПК-5 (профессиональные компетенции)	способностью использовать основные методы, способы и средства получения, хранения, переработки информации и навыки работы с компьютером как со средством управления информацией;
ПК-7 (профессиональные компетенции)	способностью участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме;

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

- основы квантовохимических методов моделирования пространственной структуры молекул и молекулярных кластеров;
- основы методов расчета физико-химических свойств молекулярных систем с использованием полуэмпирических и неэмпирических методов квантовой химии и молекулярной механики для молекул в газовой фазе и в растворе;
- понимать механизм физических процессов, происходящих в химических реакциях;
- знать методы и подходы, позволяющие анализировать и давать теоретическую интерпретацию наблюдаемым в эксперименте оптическим и магнитно-резонансным параметрам с учетом динамических процессов, происходящих на поверхностях потенциальной энергии.

2. должен уметь:

- применять квантовохимические методы для моделирования структуры молекулярных кластеров;
- использовать квантовохимические методы для учета влияния межмолекулярных взаимодействий на реакционную способность, а также на магнитные свойства молекул;
- Уметь работать с компьютером на уровне пользователя и обладать способностью применять полученные навыки работы с компьютерами как в социальной сфере, так и в области познавательной и профессиональной деятельности.

3. должен владеть:

- практическими навыками в области построения структуры молекулярных кластеров разных размеров;
- навыками теоретических расчетов эффектов среды на физико-химические свойства молекулы в рамках модели супермолекулы и континуальных моделей;
- владеть практическими навыками в решении задач, связанных с моделированием некоторых реакций изомеризации, а также бимолекулярного взаимодействия молекул в газовой фазе;

- навыками расчетов структурных, термодинамических, физико-химических характеристик молекулярных систем различной степени сложности, уметь интерпретировать экспериментальные данные в ЯМР спектроскопии, в оптической и молекулярной спектроскопии и фотохимии;
- владеть основными методами, способами и средствами получения, хранения и переработки информации, владеть навыками работы с компьютером как средством управления информацией. Владеть навыками работы с учебной и научной литературой.

4. должен демонстрировать способность и готовность:

к решению задач, связанных с атомно-молекулярным строением вещества, работать с современными образовательными и информационными технологиями.

#### 4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных(ые) единиц(ы) 108 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 8 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

#### 4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

##### Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Орбитальная симметрия в электроциклических реакциях.	8	1	2	2	0	
2.	Тема 2. Диаграммы корреляции Малликена и принцип сохранения орбитальной симметрии.	8	2	2	2	0	
3.	Тема 3. Эмпирические методы оценок реакционной способности в нуклеофильных и электрофильных реакциях.	8	3	2	2	0	
4.	Тема 4. Поверхность потенциальной энергии.	8	4	2	3	0	Контрольная работа

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
5.	Тема 5. Межмолекулярные взаимодействия.	8	5	2	2	0	
6.	Тема 6. Процессы сольватации.	8	6	2	3	0	
7.	Тема 7. Квантовохимические методы моделирования структуры молекулярных кластеров.	8	7	2	2	0	Письменная работа
8.	Тема 8. Квантовохимические методы учета эффектов растворителя.	8	8	2	2	0	Письменное домашнее задание
9.	Тема 9. Методы молекулярной механики.	8	9	2	2	0	
10.	Тема 10. Методы прямой молекулярной динамики.	8	10	2	0	0	
11.	Тема 11. Программный квантовомеханический комплекс GAMESS.	8	11	2	2	0	Тестирование
12.	Тема 12. Магнитно-резонансные параметры как наиболее эффективные экспериментальные методы изучения структуры молекул в растворах и твердой фазе.	8	12	2	2	0	
13.	Тема 13. Методы вычисления магнитно-резонансных параметров (ЯМР).	8	13	2	2	0	
14.	Тема 14. Координационные соединения. Теория кристаллического поля и теория поля лигандов. Спектрохимический ряд.	8	14	2	2	0	

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
15.	Тема 15. Спин-кроссовер.	8	15	2	2	0	
	Тема . Итоговая форма контроля	8		0	0	0	Зачет
	Итого			30	30	0	

#### 4.2 Содержание дисциплины

##### Тема 1. Орбитальная симметрия в электроциклических реакциях.

###### **лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Введение в курс. Орбитальная симметрия в электроциклических реакциях. Конротаторные и дисротаторные повороты в термических и фотохимических реакциях циклобутена в бутадиен.

###### **практическое занятие (2 часа(ов)):**

Сравнение с результатами корректных квантовомеханических расчетов в реакции изомеризации производных циклобутена в производные бутадиена

##### Тема 2. Диаграммы корреляции Малликена и принцип сохранения орбитальной симметрии.

###### **лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Теорема Неймана-Вигнера и правила Вудворда-Хофмана.. Диаграммы корреляции Малликена и принцип сохранения орбитальной симметрии. Разрешенные и запрещенные химических реакций в основном и возбужденном состоянии

###### **практическое занятие (2 часа(ов)):**

Реакция взаимодействия двух молекул этилена при параллельном сближении с точки зрения принципа сохранения орбитальной симметрии. Реакция Дильса-Альдера.

##### Тема 3. Эмпирические методы оценок реакционной способности в нуклеофильных и электрофильных реакциях.

###### **лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Эмпирические методы оценок реакционной способности в нуклеофильных и электрофильных реакциях. Граничные орбитали взаимодействующих молекул и оптимальный путь химической реакции. Нуклеофильные и электрофильные реакции. Реакции SN2 с сохранением конфигурации и с обращением конфигурации. Вальденовское обращение. Реакции с участием соединений, содержащих атом фосфора. Постулат Хэммонда

###### **практическое занятие (2 часа(ов)):**

Используя полуэмпирический метод метод AM1 на примере реакций присоединения к олефинам синглетных карбенов определить, ведут ли себя карбены как электрофилы или как нуклеофилы.

##### Тема 4. Поверхность потенциальной энергии.

###### **лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Поверхность потенциальной энергии. Критические точки на поверхностях потенциальной энергии. Гессиан. Координата реакции. Минимально-энергетический путь реакции. Локальные и глобальные минимумы Переходное состояние, барьер активации.

###### **практическое занятие (3 часа(ов)):**

Переходный вектор. Интермедиаты. Определение внутренней координаты реакции. Методы расчетов внутренней координаты реакции.

##### Тема 5. Межмолекулярные взаимодействия.

###### **лекционное занятие (2 часа(ов)):**



Межмолекулярные взаимодействия. Сильные и слабые взаимодействия. Ван-дер-Ваальсовы молекулы. Роль слабых взаимодействий в биофизических и биохимических процессах

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Влияние межмолекулярных взаимодействий (ММВ) на свойства молекул, на скорость и направление реакции, на химические сдвиги и т.п.

**Тема 6. Процессы сольватации.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Процессы сольватации. Специфические и неспецифические взаимодействия. Первичная и вторичная сольватные оболочки. Координационное число. Водородные связи и донорно-акцепторные взаимодействия как пример сильных взаимодействий

**практическое занятие (3 часа(ов)):**

Как рассчитать энергию связи комплекса. Суперпозиционная ошибка базисного набора.

**Тема 7. Квантовохимические методы моделирования структуры молекулярных кластеров.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Квантовохимические методы моделирования структуры молекулярных кластеров.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Практическая реализация на персональных компьютерах, знакомство с программами ChemOffice, Hyperchem. Моделирование пространственной структуры молекулярных кластеров в рамках модели супермолекулы.

**Тема 8. Квантовохимические методы учета эффектов растворителя.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Квантовохимические методы учета эффектов растворителя. Модель супермолекулы. Континуальная модель учета влияния среды (макроскопическое приближение). Модель Кирквуда-Онзагера для учета эффектов среды

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Энергия сольватации как составляющая ряда вкладов. Модель реактивного поля. Теория самосогласованного реактивного поля (SCRF). Поляризованная континуальная модель (PCM).

**Тема 9. Методы молекулярной механики.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Методы молекулярной механики. Параметры метода. Энергия напряжения. Потенциалы.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Комбинированные методы молекулярной механики и квантовой механики КМ/ММ. Методы молекулярной механики в рамках программы ChemOffice, Hyperchem

**Тема 10. Методы прямой молекулярной динамики.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Методы прямой молекулярной динамики. Применение методов молекулярной механики и молекулярной динамики для изучения структуры и физикохимических свойств макромолекул.

**Тема 11. Программный квантовомеханический комплекс GAMESS.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Программный квантовомеханический комплекс GAMESS.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Ключевые слова и команды для расчетов энергии молекулярных систем, оптимизации геометрии, расчетов переходного состояния и внутренней координаты реакции.

**Тема 12. Магнитно-резонансные параметры как наиболее эффективные экспериментальные методы изучения структуры молекул в растворах и твердой фазе.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**



Магнитно-резонансные параметры как наиболее эффективные экспериментальные методы изучения структуры молекул в растворах и твердой фазе. Тензор ядерного магнитного экранирования. Константа спин-спинового взаимодействия КССВ. Гамильтониан ? три вклада в спин-спиновое взаимодействие. Связь КССВ с пространственной структурой молекулы в жидкости.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Связь КССВ с пространственной структурой молекулы в жидкости.

**Тема 13. Методы вычисления магнитно-резонансных параметров (ЯМР).**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Методы вычисления магнитно-резонансных параметров (ЯМР). Проблема калибровочной инвариантности. Теория возмущений и вариационный метод расчета тензора ядерного магнитного экранирования. Связанный метод Хартри-Фока.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Эмпирические методы интерпретации химических сдвигов. Вклад электрического поля в константу ЯМ экранирования. Вклад магнитно-анизотропных эффектов.

**Тема 14. Координационные соединения. Теория кристаллического поля и теория поля лигандов. Спектрохимический ряд.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Координационные соединения. Теория кристаллического поля и теория поля лигандов. Спектрохимический ряд. Случай слабого и сильного кристаллического поля. Разрешенные и запрещенные переходы. Магнитные свойства. Оптические спектры. Правило Лапорта. Эффект Яна-Теллера.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Определить конфигурации d-электронов центрального иона в тетраэдрических комплексах, для которых теоретически возможны низкоспиновые состояния

**Тема 15. Спин-кроссовер.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Спин-кроссовер. Спин-кроссовер в гексакоординированных комплексах Fe(II) с азотсодержащими лигандами. LIESST-эффект в гексакоординированных комплексах Fe(II)

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Дать объяснение того факта, что спин-кроссовер в гексакоординированных комплексах Fe(II) происходит при условии, если основным состоянием является синглет, а разность энергий между низкоспиновым и высокоспиновым состояниями системы не превышает нескольких ккал/моль.

**4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)**

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
4.	Тема 4. Поверхность потенциальной энергии.	8	4	подготовка к контрольной работе	14	контрольная работа
7.	Тема 7. Квантовохимические методы моделирования структуры молекулярных кластеров.	8	7	Моделирование пространственной структуры молекулярных кластеров разных типов	10	Письменная работа

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
8.	Тема 8. Квантовохимические методы учета эффектов растворителя.	8	8	Теория самосогласованного реактивного поля (SCRF). Поляризованная континуальная модель (PCM).	10	контрольная работа
11.	Тема 11. Программный квантовомеханический комплекс GAMESS.	8	11	Ключевые слова и команды для расчетов энергии молекулярных систем, оптимизации геометрии, расчетов п	14	тестирование
	Итого				48	

### 5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Освоение дисциплины "Моделирование молекулярных процессов в химических реакциях" предполагает использование в учебном процессе как традиционных (лекции, практические занятия с использованием методических материалов и компьютерной техники), так и инновационных образовательных технологий с применением активных и интерактивных форм проведения занятий: выполнение ряда практических заданий с использованием современных мощных программных комплексов и электронных баз данных; которые студенты должны освоить, мультимедийных программ, включающих подготовку и выступления студентов на семинарских занятиях с фото-, аудио- и видеоматериалами по предложенной тематике. Используются такие образовательные технологии:

- проверка домашних заданий,
- проверка решений предложенных задач по изучаемому материалу на компьютерах;
- постановка перед студентами вопроса по теме, которая еще только будет изучаться, и студенты должны дать ответ, основываясь на интуиции, а затем этот вопрос подробно изучается.

### 6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

**Тема 1. Орбитальная симметрия в электроциклических реакциях.**

**Тема 2. Диаграммы корреляции Малликена и принцип сохранения орбитальной симметрии.**

**Тема 3. Эмпирические методы оценок реакционной способности в нуклеофильных и электрофильных реакциях.**

**Тема 4. Поверхность потенциальной энергии.**

контрольная работа , примерные вопросы:

Поверхность потенциальной энергии. Критические точки на поверхностях потенциальной энергии. Гессиан. Координата реакции. Минимально-энергетический путь реакции. Локальные и глобальные минимумы. Переходное состояние, барьер активации. Переходный вектор. Интермедиаты. Определение внутренней координаты реакции. Методы расчетов внутренней координаты реакции.

**Тема 5. Межмолекулярные взаимодействия.**

**Тема 6. Процессы сольватации.**

**Тема 7. Квантовохимические методы моделирования структуры молекулярных кластеров.**

Письменная работа , примерные вопросы:

Моделирование пространственной структуры молекулярных кластеров в рамках модели супермолекулы для молекулы ФОС в окружении молекул воды

**Тема 8. Квантовохимические методы учета эффектов растворителя.**

контрольная работа , примерные вопросы:

Теория самосогласованного реактивного поля (SCRF) и Поляризованная континуальная модель (PCM) в применении к конкретным молекулярным кластерам

**Тема 9. Методы молекулярной механики.**

**Тема 10. Методы прямой молекулярной динамики.**

**Тема 11. Программный квантовомеханический комплекс GAMESS.**

тестирование , примерные вопросы:

Ключевые слова и команды для расчетов энергии молекулярных систем, оптимизации геометрии, расчетов переходного состояния и внутренней координаты реакции - применить для моделирования реакции изомеризации циклобутена в бутадиен

**Тема 12. Магнитно-резонансные параметры как наиболее эффективные экспериментальные методы изучения структуры молекул в растворах и твердой фазе.**

**Тема 13. Методы вычисления магнитно-резонансных параметров (ЯМР).**

**Тема 14. Координационные соединения. Теория кристаллического поля и теория поля лигандов. Спектрохимический ряд.**

**Тема 15. Спин-кроссовер.**

**Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к зачету:

**ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ ПО КУРСУ "МОДЕЛИРОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ В ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЯХ"**

Практическое занятие ♦ 1. Анализ орбитальной симметрии в электроциклических и бимолекулярных реакциях.

Практическое занятие ♦ 2. Знакомство с программой HYPERCHEM и получение первых навыков работы с ним. Возможности программы. Выбор метода расчета. Выбор метода оптимизации.

Практическое занятие ♦ 3. Практическое занятие по использованию методов молекулярной механики для расчетов оптимизированной структуры молекул (2 часа)

Практическое занятие ♦ 4. Получение первых навыков по моделированию структуры кластеров, расчету оптимизированной геометрии молекулы и сохранению данных в разных форматах по программе HYPERCHEM

Практическое занятие ♦ 5. Знакомство с программой ChemOffice и получение первых навыков работы с ним. Возможности программы. Выбор метода расчета. Выбор метода оптимизации

Практическое занятие ♦ 6. Знакомство с программой GAMESS. Описание ключевых слов, опций, формирование задания для оптимизации геометрии молекулы

Практическое занятие ♦ 7. Знакомство с программой GAMESS. Описание ключевых слов, опций для формирования задания для поиска переходного состояния в химической реакции. Тестовые расчеты на модельных системах.

Практическое занятие ♦ 8. Получение первых навыков по расчетам путей химических реакций, поиска переходных состояний по программе GAMESS.

Практическое занятие ♦ 9. решение конкретной задачи по моделированию молекулярного кластера, поиска оптимизированной геометрии кластера, Расчеты структуры предреакционных комплексов, поиска переходного состояния в бимолекулярной реакции.

Примерные вопросы к зачету:

1. Электроциклические реакции. Корреляция молекулярных орбиталей реагентов и продуктов.
2. Реакция бутадиен-циклобутен (сравнение результатов расчета реакционной координаты методом МО Хюккеля и методом *ab initio*).
3. Координата реакции. Экзотермические и эндотермические реакции.
4. Поверхность потенциальной энергии. Конические пересечения поверхностей потенциальной энергии в двухатомных и многоатомных молекулярных системах.
5. Метод граничных орбиталей. Теория возмущения молекулярных орбиталей.
6. Возможные механизмы нуклеофильной атаки. Вальденовское обращение в реакции производных метана с нулеофильными реагентами.
7. Влияние среды на химические реакции. Межмолекулярные взаимодействия.
8. Квантовохимические методы учета влияния среды. Модель "супермолекулы".
9. Метод молекулярной механики.
10. Теория кристаллического поля и теория поля лигандов.
11. Локализация и делокализация в квантовой химии.
12. Ядерное магнитное экранирование (теория возмущений и вариационный метод).

Полный список вопросов к зачету содержится в Приложении 1 к программе.

### 7.1. Основная литература:

1. Поверхности потенциальной энергии молекулярных систем. Квантовохимические методы анализа ППЭ : учебное пособие / Р. М. Аминова .? Казань : Казанский государственный университет, 2009 .? 124 с.
2. Основы современной квантовой химии : учебное пособие для студентов и магистрантов физ. и хим. фак. Казан. гос. ун-та / Р. М. Аминова .? Казань : [б. и.], 2004 .? 105 с.
3. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: Учебное пособие для вузов / Цирельсон В.Г. - 2-е изд. (эл.). - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. - 2012.-496 с. - Издательство "Лань" Электронно-библиотечная система.  
[http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_id=3150](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=3150)

### 7.2. Дополнительная литература:

1. Федотов М.А. Ядерный магнитный резонанс в неорганической и координационной химии (растворы и жидкости) / М.А. Федотов. -М.: Физматлит, 2009. - 383 с.
2. Молекулярная спектроскопия биологических сред : учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по направлениям подгот. дипломир. специалистов "Биомед. техника" и "Биомед. инженерия" / В. М. Сидоренко.? М. : Высш. шк., 2004.? 190 с.
3. Молекулярное моделирование : теория и практика / Х.-Д. Хельтье [и др.] ; под ред. В. А. Палюлина и Е. В. Радченко ; пер. с англ. А. А. Олиференко [и др.]? Москва : Бином. Лаборатория знаний, 2009.? 318 с.
4. Молекулярная и нанофармакология / Н. Л. Шимановский, М. А. Епинетов, М. Я. Мельников.? Москва : Физматлит, 2010.? 623 с.

### 7.3. Интернет-ресурсы:

Программа Chemoffice - <http://chemoffice-ultra.updatestar.com/ru>

Программа GAMESS - [http://ctkemsu.narod.ru/lecture\\_GAMESS.pdf](http://ctkemsu.narod.ru/lecture_GAMESS.pdf)

Программа PC GAMESS / Firefly - C:\GAMESS\GAMESS.EXE >MYTASK.OUT

Программа quantum-espresso - <http://www.quantum-espresso.org>

Программа Hyperchem - <http://www.hyper.com/registrationpage/tabid/469/Default.aspx>

### 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Моделирование молекулярных процессов в химических реакциях" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "БиблиоРоссика", доступ к которой предоставлен студентам. В ЭБС "БиблиоРоссика" представлены коллекции актуальной научной и учебной литературы по гуманитарным наукам, включающие в себя публикации ведущих российских издательств гуманитарной литературы, издания на английском языке ведущих американских и европейских издательств, а также редкие и малотиражные издания российских региональных вузов. ЭБС "БиблиоРоссика" обеспечивает широкий законный доступ к необходимым для образовательного процесса изданиям с использованием инновационных технологий и соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.



Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. 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, УМК, 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 профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен студентам. 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.

Аудитория с мультимедиапроектором, ноутбуком и экраном.

Для работы со студентами кафедра химической физики оснащена комплексом персональными компьютерами.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 011200.62 "Физика" и профилю подготовки не предусмотрено.



Автор(ы):

Аминова Р.М. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Аганов А.В. \_\_\_\_\_

Салихов К.М. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.