

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 6112217

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 "БЗ.ДВ.9 Профессиональный" основной образовательной программы 011200.62 Физика и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 4 курсе, 8 семестр.

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

Дисциплины по выбору "блок БЗ.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": БЗ.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 нанофотоники, 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. Гессинан. 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 бутадиев

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

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

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.