

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО:

И.о. декана химического факультета
А. С. Князев

Рабочая программа дисциплины

Компьютерное моделирование органических молекул

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки / специализация:
Химия современных материалов и технологий

Форма обучения
Очная

Квалификация
химик-исследователь

Год приема
2023

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
А.С. Князев

Председатель УМК
Л.Н. Мишенина

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ПК-1 Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских и/или производственных задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках.

ПК-2 Способен к решению профессиональных производственных задач.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИПК 1.1 Умеет разрабатывать стратегию научных исследований, составлять общий план и детальные планы отдельных стадий

ИПК 1.2 Умеет выбирать экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, используя достижения современной химической науки, и исходя из имеющихся, материальных, информационных и временных ресурсов

ИПК 1.3 Умеет использовать современное физико-химическое оборудование для получения и интерпретации достоверных результатов исследования в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках, применяя взаимодополняющие методы исследования

ИПК 2.1 Умеет анализировать имеющиеся нормативные документы по системам стандартизации, разработки и производству химической продукции и предлагать технические средства для решения поставленных задач

ИПК 2.2 Умеет производить оценку применимости стандартных и/или предложенных в результате НИР технологических решений на применимость с учетом специфики изучаемых процессов

2. Задачи освоения дисциплины

– Освоить понятийный аппарат и физические основы современных квантово-химических методов исследования физико-химических свойств многоатомных молекул;

– Освоить программы и методики выполнения квантово-химических расчетов физико-химических свойств органических молекул.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к факультативным дисциплинам, предлагается обучающимся на выбор.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Второй семестр, зачет

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: математический анализ, физика, квантовая химия, органическая химия, физическая химия.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 72 часов, из которых:

-лекции: 12 ч.

-практические занятия: 20 ч.

в том числе практическая подготовка: 20 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Теоретические основы квантовой химии. Квантовая химия - квантовая механика молекул. Исторический обзор развития квантовой химии. Основные постулаты квантовой химии. Операторы физических величин, волновые функции, собственные значения, линейная матричная алгебра. Проблема расчета и интерпретации физических и химических свойств молекул. Уравнение Шредингера для водородоподобных атомов. Квантовые числа, собственные функции, энергетические уровни и состояния. Электронные конфигурации многоэлектронных атомов. Спин электрона и принцип Паули. Уравнение Шредингера для многоатомной молекулы. Основные приближения методов квантовой химии: нерелятивистский гамильтониан, адиабатическое приближение Борна-Оппенгеймера, одноэлектронное приближение. Детерминантные многоэлектронные волновые функции Слейтера.

Тема 2. Метод Хартри-Фока. Уравнения Хартри-Фока. Способы решения и принцип самосогласованного поля. Итерационная процедура.

Тема 3. Метод молекулярных орбиталей. Представление молекулярной орбитали в виде линейной комбинации атомных орбиталей. Типы атомных орбиталей, используемых в квантово-химических расчетах молекул: слейтеровские и гауссовские атомные орбитали. Распределение электронной плотности. Электронные заселенности атомов и химических связей по Малликену. Метод Рутана (ССП-МО-ЛКАО). Уравнения метода и способы их решения. Интерпретация результатов расчета. Теорема Купменса для потенциалов ионизации молекул. Метод ЭСХА. Приближение нулевого дифференциального перекрытия атомных орбиталей. Полуэмпирические методы решения уравнений Рутана с учетом всех валентных электронов.

Тема 4. Метод ЧПДП для расчетов возбужденных электронных состояний многоатомных органических молекул. Уравнения метода. Стандартная спектроскопическая система параметров.

Тема 5. Метод молекулярного электростатического потенциала (МЭСП) для оценки специфических межмолекулярных взаимодействий. Универсальные и специфические межмолекулярные взаимодействия. Уравнения и приближения метода МЭСП. Область применения метода, преимущества и недостатки.

Тема 6. Фотофизические процессы. Квантовые выходы фотопроцессов. Законы и правила люминесценции. Волновые функции электронно-колебательных состояний многоатомных молекул. Теория электронных переходов в многоатомных органических соединениях. Расчеты констант скоростей фотофизических процессов. Фосфоресценция органических соединений. Квантово-химическая модель фотолиза химических связей в органических соединениях. Межмолекулярные фотофизические процессы в органических системах. Межмолекулярный перенос энергии электронного возбуждения.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине осуществляется в виде выполнения заданий на практических занятиях и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Изучение дисциплины завершается зачетом, допуском к которому является сдача заданий, выполняемых на практических занятиях.

Зачет проводится в устной форме в виде защиты индивидуального задания с презентацией и ответами на вопросы аудитории (ПК-1).

Результаты презентации определяются оценками «зачтено» или «не зачтено».

Оценка «зачтено» выставляется студенту, если содержание доклада изложено логично и последовательно; даны исчерпывающие и правильные ответы на уточняющие и дополнительные вопросы. Допускаются небольшие ошибки и погрешности, не имеющие принципиального характера.

Оценка «не зачтено» выставляется студенту, если он не дал ответа на большинство вопросов при защите индивидуального задания; дал неверные, содержащие фактические ошибки, ответы на все вопросы.

11. Учебно-методическое обеспечение

1. Квантово-химическое исследование спектрально-люминесцентных и физико-химических свойств многоатомных молекул. I. Расчет молекулярных координат. (Методические указания). Составитель: к.ф.-м.н. Базыль О.К. Томск: изд-во ТГУ, 2002, 15 с.

2. Квантово-химическое исследование спектрально-люминесцентных и физико-химических свойств многоатомных молекул. II. Расчет электронной структуры и спектров многоатомных молекул. (Методические указания). Составители: д.ф.-м.н., проф. В.Я. Артюхов, к.ф.-м.н. Базыль О.К. Томск: изд-во ТГУ, 2002, 42 с.

3. Квантово-химическое исследование спектрально-люминесцентных и физико-химических свойств многоатомных молекул. III. Исследование фотофизических процессов в многоатомных молекулах. (Методические указания). Составитель: к.ф.-м.н. Базыль О.К. Томск: изд-во ТГУ, 2002, 29 с.

4. Квантово-химическое исследование спектрально-люминесцентных и физико-химических свойств многоатомных молекул. IV. Оценка протоно-акцепторных свойств и специфических межмолекулярных взаимодействий многоатомных молекул методом МЭСП. (Методические указания). Составители: д.ф.-м.н., проф. В.Я. Артюхов, к.ф.-м.н. Базыль О.К. Томск: изд-во ТГУ, 2002, 24 с.

5. Квантово-химическое исследование спектрально-люминесцентных и физико-химических свойств многоатомных молекул. V. Расчет заселенностей химических связей в многоатомных молекулах. (Методические указания). Составители: д.ф.-м.н., проф. В.Я. Артюхов, к.ф.-м.н. Базыль О.К. Томск: изд-во ТГУ, 2002, 16 с.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Артюхов В. Я. Компьютерная квантовая химия: Учебно-методическое пособие / В. Я. Артюхов, О. К. Базыль. – Томск : Томский государственный ун-т, 2010 – 128 с.

– Ширяев А. К. Квантовая механика и квантовая химия: Учебно-методическое пособие / А. К. Ширяев. – Самара : Изд. Самар. гос. техн. ун-та, 2010. – 119 с.

б) дополнительная литература:

– Майер Г. В. Электронно-возбужденные состояния и фотохимия органических соединений / Г. В. Майер [и др.] – Наука, Новосибирск, 1997. – 232 с.

– Теренин А. Н. Фотоника молекул красителей и родственных органических соединений / А. Н. Теренин. – Л. : Наука, 1967. – 615 с. URL: <http://sun.tsu.ru/limit/2016/000104828/000104828.djvu>.

– Мак-Глинн С. Молекулярная спектроскопия триплетного состояния / С. Мак-Глинн, Т. Адзуми, М. Киносита; Пер. с англ. : Ю. И. Козлова и Р. Н. Нурмухаметова; Под ред. Х. С. Багдасарьяна. - М. : Мир, 1972. - 448 с.

в) ресурсы сети Интернет:

– Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU – <http://elibrary.ru/defaultx.asp>;

– [Библиографическая и реферативная база данных рецензируемой научной литературы Scopus – scopus.com/home.uri](http://scopus.com/home.uri).

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

- Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);
- публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

– Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>

– Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>

– ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>

– ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>

– Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>

– ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>

– ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

15. Информация о разработчиках

Меньщикова Татьяна Викторовна, канд. физ.-мат. наук, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.