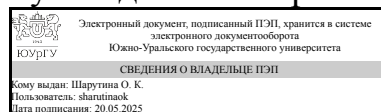


ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель направления



О. К. Шарутина

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины 1.О.07 Теория химической связи: введение в расчетные методы
для направления 04.04.01 Химия

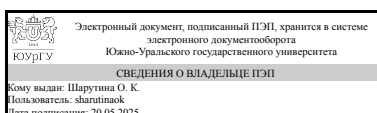
уровень Магистратура

форма обучения очная

кафедра-разработчик Теоретическая и прикладная химия

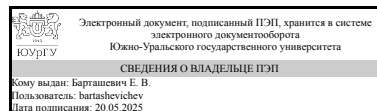
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 Химия, утверждённым приказом Минобрнауки от 13.07.2017 № 655

Зав.кафедрой разработчика,
д.хим.н., проф.



О. К. Шарутина

Разработчик программы,
д.хим.н., доц., профессор



Е. В. Барташевич

1. Цели и задачи дисциплины

Усвоение студентом теоретических представлений о типах и свойствах химических связей в атомно-молекулярных системах органических и неорганических соединений. Изучение влияния взаимосвязи пространственного строения с реакционной способностью и физико-химическими свойствами вещества, а также их биологической активностью, изучение классификации химических связей, основных свойств и их характеристики. Студент должен научиться выполнять типовые квантово-химические расчеты, включая оптимизацию геометрии молекул методами теории функционала плотности, уметь использовать расчетную волновую функцию для описания свойств химических связей на основе специализируемого программного обеспечения, освоить навыки поиска отличительных особенностей химических связей в многокомпонентных системах и интерпретировать результаты расчетов и моделирования, объясняя направления реакций и реакционную способность молекул.

Краткое содержание дисциплины

Типы химических связей. Исторически сложившиеся концепции ковалентных и ионных взаимодействий. Классификация типов связей. Эволюция понятий "донорно-акцепторное взаимодействие", "комплекс с переносом заряда". Современная концепция и классификации ковалентных взаимодействий: понятие связей со смещенным зарядом, инструменты их описания. Использование теории функционала плотности для описания электрон-электронных взаимодействий, электрон-ионных взаимодействий. Особенности компьютерного моделирования изолированных молекул и молекулярных кластеров в задачах оценки силы и особенностей нековалентных взаимодействий. Особенности компьютерного моделирования периодических систем в задачах описания нековалентных взаимодействий. Свойства электронной плотности в описании свойств химических связей: индексы порядков связей, индексы делокализации электронов.

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ОПК-2 Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук	Знает: классификацию химических связей, основные свойства химических связей и их характеристики внутри классов Умеет: выполнять типовые квантово-химические расчеты (включая оптимизацию геометрии молекул методами теории функционала плотности), использовать расчетную волновую функцию для описания свойств химических связей на основе специализированного программного обеспечения Имеет практический опыт: поиска отличительных особенностей химических связей в многокомпонентных системах, интерпретации результатов расчетов и моделирования для объяснения направления реакций и реакционной

	способности молекул
--	---------------------

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ учебного плана	Перечень последующих дисциплин, видов работ
Нет	Производственная практика (научно-исследовательская работа) (2 семестр), Производственная практика (научно-исследовательская работа) (3 семестр)

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам студента, необходимым при освоении данной дисциплины и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Нет

4. Объём и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 72 ч., 38,5 ч. контактной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах
		Номер семестра
		1
Общая трудоёмкость дисциплины	72	72
<i>Аудиторные занятия:</i>	32	32
Лекции (Л)	0	0
Практические занятия, семинары и (или) другие виды аудиторных занятий (ПЗ)	32	32
Лабораторные работы (ЛР)	0	0
<i>Самостоятельная работа (СРС)</i>	33,5	33,5
Подготовка к экзамену	13	13
Подготовка отчетов и презентаций по темам Практических занятий.	20,5	20.5
Консультации и промежуточная аттестация	6,5	6,5
Вид контроля (зачет, диф.зачет, экзамен)	-	экзамен

5. Содержание дисциплины

№ раздела	Наименование разделов дисциплины	Объем аудиторных занятий по видам в часах			
		Всего	Л	ПЗ	ЛР
1	Квантово-химические расчеты электронной плотности молекул	8	0	8	0
2	Анализ потенциалов на изоповерхности электронной плотности молекул	8	0	8	0
3	Порядки химических связей в молекулах и комплексах	8	0	8	0

4	Анализ ароматичности молекул на основе свойств электронной плотности	8	0	8	0
---	--	---	---	---	---

5.1. Лекции

Не предусмотрены

5.2. Практические занятия, семинары

№ занятия	№ раздела	Наименование или краткое содержание практического занятия, семинара	Кол-во часов
1	1	Выполнение локализации равновесной геометрии молекул методом теории функционала плотности	4
2	1	Методы теории функционала плотности	4
3	2	Электростатический потенциал молекул	4
4	2	Потенциал действующий на электрон в молекуле	4
5	3	Сравнение порядков химических связей, полученных разными методами	4
6	3	Расчеты порядков химических связей	4
7	4	Функция влияния в оценке вкладов атомов в свойство химической связи	4
8	4	Ароматичность молекул, индексы ароматичности, взаимосвязь со свойствами химических связей	4

5.3. Лабораторные работы

Не предусмотрены

5.4. Самостоятельная работа студента

Выполнение СРС			
Подвид СРС	Список литературы (с указанием разделов, глав, страниц) / ссылка на ресурс	Семестр	Кол-во часов
Подготовка к экзамену	1. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Текст] учеб. пособие для вузов по химико-технол. направлениям и специальностям В. Г. Цирельсон. - 3-е изд., испр. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. Главы 3-6, с. 139-435. 2. Бейдер, Р. Атомы в молекулах: Квантовая теория Учеб. Р. Бейдер; Пер. с англ. Е. С. Апостоловой и др.; Под ред. М. Ю. Антипина, В. Г. Цирельсона. - М.: Мир, 2001. - 532 с. Все главы.	1	13
Подготовка отчетов и презентаций по темам Практических занятий.	Tian Lu, Feiwu Chen, Multiwfn: A multifunctional wavefunction analyzer, J. Comput. Chem., 33, 580-592 (2012) http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jcc.22885/abstract Charge decomposition analysis (CDA) module: Meng Xiao, Tian Lu, Generalized Charge Decomposition Analysis (GCDA) Method, J. Adv. Phys. Chem., 4, 111-124 (2015) http://dx.doi.org/10.12677/JAPC.2015.44013 (The generalized CDA method implemented in Multiwfn is introduced in this paper) A. Granovsky, Firefly, version 2013. http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html	1	20,5

6. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации

Контроль качества освоения образовательной программы осуществляется в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе оценивания результатов учебной деятельности обучающихся.

6.1. Контрольные мероприятия (КМ)

№ КМ	Се-местр	Вид контроля	Название контрольного мероприятия	Вес	Макс. балл	Порядок начисления баллов	Учитывается в ПА
1	1	Текущий контроль	Отчет по теме №1	1	15	Защита отчета по каждой практической работе включает в себя 3 этапа: А - выполнение расчетов, В - оформление результатов в виде отчета в электронной форме, С - оформление презентации и краткий доклад (3-5 мин) по теоретическим вопросам темы. Всего за один отчет можно набрать 15 баллов. Каждый успешно выполненный этап (А, В, С) практической работы оценивается в 5 баллов. Один балл снижается за ошибки в оформлении отчета (этап В) либо презентации (этап С) - отступлении от требований к оформлению ВКР; два балла снижаются за ошибки в расчетах (этап А), малосодержательные подписи к рисункам (этап В), несостоятельность прокомментировать результаты в докладе; три либо четыре балла снижаются за не полностью выполненные расчеты (этап А), неправильно выбранные методы вычислений (этап А), грубые ошибки в отчете (этап В) или презентации (этап С). Отсутствие доклада по теме отчета, т.е. невыполнение этапа С, допускает получение нулевых баллов только за этот этап, при этом баллы за выполненные этапы А и В сохраняются. Однако невыполнение расчетов в одной из работ (этапа А) или отсутствие отчета (этапа В) расценивается как невыполнение практической работы и текущего задания курса.	экзамен
2	1	Текущий контроль	Отчет по теме №2	1	15	Защита отчета по каждой практической работе включает в себя 4 этапа: А - выполнение расчетов, В - оформление результатов в виде отчета в электронной форме, С - оформление презентации; D - краткий доклад (3-5 мин) по теоретическим вопросам темы. Всего за один отчет можно набрать 20	экзамен

					баллов. Каждый успешно выполненный этап (А, В, С или D) практической работы оценивается в 5 баллов. Один балл снижается за ошибки в оформлении отчета (этап В) либо презентации (этап С) - отступлении от требований к оформлению ВКР; два балла снижаются за ошибки в расчетах (этап А), малосодержательные подписи к рисункам (этап В), несостоятельность прокомментировать результаты в докладе (этап D); три либо четыре балла снижаются за неполностью выполненные расчеты (этап А), неправильно выбранные методы вычислений (этап А), грубые ошибки в отчете (этап В) или презентации (этап С). Отсутствие доклада по теме отчета, т.е. невыполнение этапа С, допускает получение нулевых баллов только за этот этап, при этом баллы за выполненные этапы А и В сохраняются. Однако невыполнение расчетов в одной из лабораторных работ (этапа А) или отсутствие отчета (этапа В) расценивается как невыполнение практической работы и текущего задания курса. Всего за отчеты по выполненным практическим работам можно набрать 60 баллов.		
3	1	Текущий контроль	Отчет по теме №3	1	15	Защита отчета по каждой практической работе включает в себя 4 этапа: А - выполнение расчетов, В - оформление результатов в виде отчета в электронной форме, С - оформление презентации и краткий доклад (3-5 мин) по теоретическим вопросам темы. Всего за один отчет можно набрать 15 баллов. Каждый успешно выполненный этап (А, В или С) практической работы оценивается в 5 баллов. Один балл снижается за ошибки в оформлении отчета (этап В) либо презентации (этап С) - отступлении от требований к оформлению ВКР; два балла снижаются за ошибки в расчетах (этап А), малосодержательные подписи к рисункам (этап В), несостоятельность прокомментировать результаты в докладе (этап D); три либо четыре балла снижаются за неполностью выполненные расчеты (этап А), неправильно выбранные методы вычислений (этап А), грубые ошибки в отчете (этап В) или презентации (этап С). Отсутствие доклада по теме отчета, т.е. невыполнение этапа С, допускает получение нулевых баллов только за этот этап, при этом баллы за выполненные	экзамен

						этапы А и В сохраняются. Однако невыполнение расчетов в одной из лабораторных работ (этапа А) или отсутствие отчета (этапа В) расценивается как невыполнение практической работы и текущего задания курса.	
4	1	Текущий контроль	Отчет по теме №4	1	15	Защита отчета по каждой практической работе включает в себя 3 этапа: А - выполнение расчетов, В - оформление результатов в виде отчета в электронной форме, С - оформление презентации и краткий доклад (3-5 мин) по теоретическим вопросам темы. Всего за один отчет можно набрать 15 баллов. Каждый успешно выполненный этап (А, В, С) практической работы оценивается в 5 баллов. Один балл снижается за ошибки в оформлении отчета (этап В) либо презентации (этап С) - отступлении от требований к оформлению ВКР; два балла снижаются за ошибки в расчетах (этап А), малосодержательные подписи к рисункам (этап В), несостоятельность прокомментировать результаты в докладе; три либо четыре балла снижаются за не полностью выполненные расчеты (этап А), неправильно выбранные методы вычислений (этап А), грубые ошибки в отчете (этап В) или презентации (этап С). Отсутствие доклада по теме отчета, т.е. невыполнение этапа С, допускает получение нулевых баллов только за этот этап, при этом баллы за выполненные этапы А и В сохраняются. Однако невыполнение расчетов в одной из работ (этапа А) или отсутствие отчета (этапа В) расценивается как невыполнение практической работы и текущего задания курса.	экзамен
5	1	Промежуточная аттестация	Экзамен	-	40	Тест по теоретическим вопросам, определениям и понятиям. За каждый правильный и полный ответ дается 5 баллов. Баллы снижаются на 50% за невыбор одного из двух правильных ответов, снижаются до 33%, если выбран только один из трех правильных ответов или выбор неправильного ответа сочетается с невыбором правильного ответа в вопросе со множественным выбором. Всего можно набрать максимум 40 баллов.	экзамен

6.2. Процедура проведения, критерии оценивания

Вид промежуточной аттестации	Процедура проведения	Критерии оценивания
экзамен	Проводится в форме электронного теста в компьютерном классе. Для подготовки к промежуточной аттестации выдается список вопросов по определениям терминов, обсуждаемых в курсе «Теория химической связи». Тест проводится по вариантам и включает 8 вопросов для каждого студента, длится 15 минут. Тест не является обязательным. Возможно выставление оценки по текущему контролю.	В соответствии с пп. 2.5, 2.6 Положения

6.3. Паспорт фонда оценочных средств

Компетенции	Результаты обучения	№ КМ				
		1	2	3	4	5
ОПК-2	Знает: классификацию химических связей, основные свойства химических связей и их характеристики внутри классов		+			+
ОПК-2	Умеет: выполнять типовые квантово-химические расчеты (включая оптимизацию геометрии молекул методами теории функционала плотности), использовать расчетную волновую функцию для описания свойств химических связей на основе специализированного программного обеспечения	+				+
ОПК-2	Имеет практический опыт: поиска отличительных особенностей химических связей в многокомпонентных системах, интерпретации результатов расчетов и моделирования для объяснения направления реакций и реакционной способности молекул			+	+	+

Типовые контрольные задания по каждому мероприятию находятся в приложениях.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

1. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Текст] учеб. пособие для вузов по химико-технол. направлениям и специальностям В. Г. Цирельсон. - 3-е изд., испр. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. - 495 с. ил., [12] л. цв. ил.; табл.

б) дополнительная литература:

1. Штин, С. В. Физическая химия. Термохимия [Текст] учеб. пособие к лаб. работам для физ.-металлург. фак. С. В. Штин ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Физ. химия ; ЮУрГУ. - Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2014. - 39, [1] с. ил. электрон. версия

в) отечественные и зарубежные журналы по дисциплине, имеющиеся в библиотеке:

1. Известия АН РФ, серия Химия
2. Журнал структурной химии
3. Химия гетероциклических соединений

г) методические указания для студентов по освоению дисциплины:

1. Теория химической связи: введение в расчетные методы: учебное пособие / составители Е.В. Барташевич, С.А. Собалев – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2021. – 42 с.

2. Барташевич, Е. В. Строение вещества [Текст] метод. указания к лаб. работам по направлению 04.03.01 "Химия" Е. В. Барташевич, С. Э. Мухитдинова ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Теорет. и приклад. химия ; ЮУрГУ. - Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2017. - 31, [2] с. ил. электрон. версия

из них: учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студента:

1. Барташевич, Е. В. Строение вещества [Текст] метод. указания к лаб. работам по направлению 04.03.01 "Химия" Е. В. Барташевич, С. Э. Мухитдинова ; Юж.-Урал. гос. ун-т, Каф. Теорет. и приклад. химия ; ЮУрГУ. - Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2017. - 31, [2] с. ил. электрон. версия

Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной форме	Библиографическое описание
1	Дополнительная литература	Учебно-методические материалы кафедры	Charge decomposition analysis (CDA) module: Meng Xiao, Tian Lu, Generalized Charge Decomposition Analysis (GCDA) Method, J. Adv. Phys. Chem., 4, 111-124 (2015) http://dx.doi.org/10.12677/JAPC.2015.44013 (The generalized CDA method implemented in Multiwfn is introduced in this paper) http://amsmod.susu.ru/
5	Основная литература	Учебно-методические материалы кафедры	Маррел, Дж. Химическая связь пер. с англ. / Дж. Маррел, С. Кеттл, Дж. Теддер; под ред. И. В. Александрова. М., Мир, 1980. 382 с. http://amsmod.susu.ru/

Перечень используемого программного обеспечения:

1. ФГАОУ ВО "ЮУрГУ (НИУ)"-Портал "Электронный ЮУрГУ" (<https://edu.susu.ru>)(бессрочно)
2. -Firefly(бессрочно)
3. BlueSnap-Chemcraft(бессрочно)

Перечень используемых профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

1. -База данных ВИНТИ РАН(бессрочно)

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Вид занятий	№ ауд.	Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение, используемое для различных видов занятий
Практические занятия и семинары	707 (1)	Компьютерный класс