

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ  
ДОНЕЦКОЙ НАРОДНОЙ РЕСПУБЛИКИ  
ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»



УТВЕРЖДАЮ:

Первый проректор

А. А. Каракозов

(подпись)

03

2023 года

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**Б1.В.04 Теоретические методы в химии**

(код и наименование дисциплины согласно учебному плану)

Направление подготовки: 18.04.01 Химическая технология

(код и наименование направления подготовки / специальности)

Направленность  
(профиль):

«Химическая технология химико-фармацевти-  
ческих препаратов и косметических средств»

(наименование профиля / магистерской программы / специализации)

Программа:

магистратура

(бакалавриат, магистратура, специалитет)

Форма обучения:

очная

(очная, заочная, очно-заочная)

Форма обучения:	очная
Семестр(ы)	1
Общая трудоёмкость в з.е./часах	3/108
Контактная работа (час.), в том числе:	72
лекции (час.)	34
лабораторные работы (час.)	-
практические (семинарские) занятия (час.)	34
Самостоятельная работа (час.), в том числе:	18
курсовой проект (работа) (семестр/час.)	-
Контроль (экзамен, час. / зачёт)	Экзамен, 18 час.

Донецк, 2023 г.

Рабочая программа дисциплины «Теоретические методы в химии» составлена в соответствии с учебными планами по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология (профиль – «Химическая технология химико-фармацевтических препаратов и косметических средств») для 2023 года приёма по очной форме обучения.

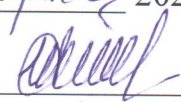
Составитель:

профессор кафедры общей физической  
и органической химии,  
д.х.н.

  
\_\_\_\_\_  
(подпись) Е.С. Карташинская


Рабочая программа **рассмотрена и принята** на заседании кафедры общей, физической и органической химии.

Протокол от «20» марта 2023 года № 8.

Заведующий кафедрой   
\_\_\_\_\_  
(подпись) Е.И. Волкова  
(Ф.И.О.)

Рабочая программа **одобрена учебно-методической комиссией** ГОУВПО «ДОННТУ» по направлению подготовки 18.04.01 Химическая технология.

Протокол от «24» марта 2023 года № 3

Председатель   
\_\_\_\_\_  
(подпись) В. В. Шаповалов  
(Ф.И.О.)

Рабочая программа **продлена** для 20\_\_ года приёма на заседании кафедры общей, физической и органической химии.

Протокол от «\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ года № \_\_\_\_\_

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_  
(подпись) (Ф.И.О.)

Рабочая программа **продлена** для 20\_\_ года приёма на заседании кафедры общей, физической и органической химии.

Протокол от «\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ года № \_\_\_\_\_

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_  
(подпись) (Ф.И.О.)

Рабочая программа **продлена** для 20\_\_ года приёма на заседании кафедры общей, физической и органической химии.

Протокол от «\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ года № \_\_\_\_\_

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_  
(подпись) (Ф.И.О.)

## **1 ОБЪЕКТ, ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ**

Дисциплина рассматривает вопросы, связанные с моделированием и расчетом свойств химических соединений.

Целью преподавания дисциплины является: формирование навыков моделирования химических соединений, редактирования и анализа геометрии трёхмерных моделей молекул, а также изучение подходов к расчету конкретных физико-химических задачи на базе исследования полученных моделей.

В результате освоения дисциплины студент должен знать

- основные вычислительные методы и способы решения задач компьютерной химии;
- методы моделирования динамики молекулярных структур;
- методы решения задач, связанных с расчётами геометрии и электронной структуры молекул: метод молекулярных орбиталей, неэмпирические методы, полуэмпирические методы;

уметь

- выполнять построение двумерных и трёхмерных моделей молекул с использованием программ ChemDraw и HyperChem,
  - расчёты физико-химических параметров в пакете Морас200;
- владеть
- принципами построения моделей молекул химических соединений в различных программных пакетах;
  - методами квантово-химических расчётов значений параметров молекул;
  - анализом результатов теоретических расчетов, получаемых в ходе использования современной вычислительной техники.

Перечисленные результаты обучения являются основой для формирования следующих компетенций:

- Способность организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок ОПК-1);
- Обладание способностью принимать конкретные технические решения при разработке технологических процессов, выбирать технические средства и технологии с учетом экологических последствий их применения, способностью использовать правила техники безопасности, производственной санитарии, пожарной безопасности и нормы охраны труда (ПК-2).

## **2 МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В ОСНОВНОЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЕ**

Дисциплина относится к части, формируемой участниками образовательных отношений Блока 1 дисциплин (модулей) учебного плана.

Базируется на знаниях, умениях и навыках, которые студент приобрел при освоении предшествующих дисциплин: «Органическая химия», «Физическая химия», «Высшая математика».

Знания, умения и навыки, приобретенные при освоении данной дисциплины, реализуются студентом при прохождении государственной итоговой аттестации и подготовке квалификационной работы магистра.

### 3 СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

#### 3.1 Распределение учебных часов по темам дисциплины и видам занятий

Наименование темы (содержательных модулей)	Количество часов				
	Всего	В том числе			
		Лекции	Лабор.	Практ. (Семина)	СР
Тема 1. Основные понятия и определения компьютерной химии. Используемые средства, программное обеспечения и методы	10	4	-	4	2
Тема 2. Элементы квантовой механики и теории строения молекул. Исходные положения квантовой механики. Уравнение Шредингера.	10	4	-	4	2
Тема 3. Исследование поверхности потенциальной энергии молекулярных систем. Оптимизация геометрии молекулярной системы.	10	4	-	4	2
Тема 4. Моделирование динамики молекулярных систем. Метод молекулярной динамики. Метод броуновского движения. Метод Монте-Карло.	10	4	-	4	2
Тема 5. Метод молекулярных орбиталей. Неэмпирические методы.	12	5	-	5	2
Тема 6. Полуэмпирические методы. Расширенный метод Хюккеля. Методы пренебрежением дифференциальным перекрыванием.	12	5	-	5	2
Тема 7. Вычисление потенциальной энергии атомно-молекулярной системы. Потенциальная энергия силового поля.	10	4	-	4	2
Тема 8. Оптимизация геометрии и конформационный анализ. Смешение вычислительных методов.	16	4	-	4	4
Контактная работа (дополнительная)	4	-	-	-	-
Курсовая работа (проект)	-	-	-	-	-
Итого по видам занятий	86	34	-	34	18
Контроль	18	-	-	-	-
<b>ИТОГО:</b>	108	34	-	34	18

## Формирование компетенций в результате освоения тем дисциплины

Компетенции	Темы дисциплины, нацеленные на формирование компетенции
ОПК-1	Темы 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8
ПК-2	Темы 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8

### 3.2 Лекции

Тема 1. Основные понятия и определения компьютерной химии. Используемые средства, программное обеспечения и методы.

Содержание темы 1: Исторический аспект. Вычислительная химия. Области применения, точность, методы.

Литература к теме 1: [[1](#), [2](#), [3](#), [4](#)]

Тема 2. Элементы квантовой механики и теории строения молекул. Исходные положения квантовой механики. Уравнение Шредингера.

Содержание темы 2: Предмет квантовой механики. Место квантовой механики среди других наук о движении. Основные этапы развития квантовой теории. Основные этапы развития квантовой теории. Принцип неопределенности. Принцип неопределенности. Операторы. Постулаты квантовой механики.

Литература к теме 2: [[1](#), [2](#), [3](#), [4](#)]

Тема 3. Исследование поверхности потенциальной энергии молекулярных систем. Оптимизация геометрии молекулярной системы.

Содержание темы 3: Определение ППЭ. ППЭ двухатомной молекулы. ППЭ многоатомной молекулы. Стационарные точки. Матрица Гесса. Оптимизация равновесной геометрии молекулы. ППЭ и химическая реакция.

Литература к теме 3: [[1](#), [2](#), [3](#), [4](#)]

Тема 4. Моделирование динамики молекулярных систем. Метод молекулярной динамики. Метод броуновского движения. Метод Монте-Карло.

Содержание темы 4: История развития метода молекулярной динамики (МД). Теоретические основы молекулярного моделирования. Уравнения движения Ньютона и их дискретизация. Стохастическая динамика. Броуновская динамика. Потенциалы взаимодействия для одноатомных молекул. Периодические граничные условия. Статистические ансамбли и термостатирование. Инструменты для молекулярного моделирования. Компьютерное молекулярное моделирование. Преимущества компьютерного моделирования. Основные методы молекулярного моделирования (методы Монте-Карло и молекулярной динамики). Использование кластерных систем для молекулярно-динамического моделирования.

Литература к теме 4: [[1](#), [2](#), [3](#), [4](#)]



Тема 5. Метод молекулярных орбиталей. Неэмпирические методы.

Содержание темы 5: Теория химической связи. Метод МО ЛКАО. Приближение Борна-Оппенгеймера. Уравнения Рутаана. Базисные наборы атомных орбиталей. Орбитали Слэтера-Зенера. Орбитали гауссова типа. Минимальные базисные наборы STO-KG. Валентно-расщепленные базисные наборы *M-NPG*. Корреляционно-согласованные базисные наборы. Электронная корреляция. Составляющие электронной корреляции. Методы учета электронной корреляции.

Литература к теме 5: [1, 2, 3, 4]

Тема 6. Полуэмпирические методы. Расширенный метод Хюккеля. Методы пренебрежением дифференциальным перекрыванием.

Содержание темы 6: Общие положения. Приближение нулевого дифференциального перекрывания. Метод CNDO и параметризация CNDO/2. Метод INDO и параметризация MINDO/3. Метод NDDO: AM1, PM3, PM6.

Литература к теме 6: [1, 2, 3, 4]

Тема 7. Вычисление потенциальной энергии атомно-молекулярной системы. Потенциальная энергия силового поля.

Содержание темы 7: Что такое поверхность потенциальной энергии молекулы? Стационарные точки ППЭ. Глобальный и локальный минимум. Седловая точка. Анализ поверхности потенциальной энергии. Определение геометрии молекулы. Конформационный анализ. Стационарные точки ППЭ и нормальные моды колебаний. Энергия нулевых колебаний. Поверхность потенциальной энергии химической реакции. Путь химической реакции. Энергетический профиль ППЭ.

Литература к теме 7: [1, 2, 3, 4]

Тема 8. Оптимизация геометрии и конформационный анализ. Смешение вычислительных методов.

Содержание темы 8: Создание трехмерной компьютерной модели молекулы. Ввод химической структуры. Оптимизация геометрии. Конформационный анализ. Искусство конформационного поиска. Комбинированные методы расчета.

Литература к теме 8: [1, 2, 3, 4]

### 3.3 Практические (семинарские) занятия

№	Тема работы	Объем, час.	Литература
1	Знакомство с программным пакетом ChemOffice. Химический редактор ChemDraw	2	[5]
2	ChemDraw. Запись схемы реакции с указанием реакционных центров	2	[5]
3	Знакомство с интерфейсом программы HyperChem	2	[5]
4	HyperChem. Построение и редактирование молекул	2	[5]

5	Создание небольших молекул в 2D и 3D	2	[5]
6	HyperChem. Формирование полипептида	2	[5]
7	Измерение параметров структур	2	[5]
8	Конформационный анализ молекул в HyperChem	2	[5]
9	Построение поверхности потенциальной энергии системы с помощью расчетов в HyperChem	2	[5]
10	Моделирование динамики и состояния равновесия. Создание отдельного цвиттериона аланина	2	[5]
11	Моделирование динамики и состояния равновесия. Сольватирование структуры	2	[5]
12	Полуэмпирический квантово-химический расчет молекулы	2	[5]
13	Оптимизация молекулярных структур в пакете Морас2000 с помощью полуэмпирических методов	2	[5]
14	Расчет термодинамических параметров образования соединений в пакете Морас2000 с помощью полуэмпирических методов	2	[5]
15	Учет сольватации в пакете Морас2000 на примере аланина	2	[5]
16	Моделирование переходного состояния в пакете Морас2000	2	[5]
17	Построение кластеров ПАВ в пакете Морас2000	2	
<b>ИТОГО:</b>		34	

### 3.4 Лабораторные работы

Учебным планом выполнение лабораторных работ не запланировано.

### 3.5 Самостоятельная работа студента

№	Виды самостоятельной работы студента	Объем, час.
1	Изучение лекционного материала (не менее 50% от объема лекций)	9
2	Подготовка к лабораторным работам (не менее 50% от объема аудиторных лабораторных занятий)	
3	Подготовка к практическим работам (не менее 50% от объема аудиторных практических занятий)	9
4	Выполнение курсового проекта (36 часов)	
5	Выполнение курсовой работы (27 часов)	
6	Выполнение индивидуального задания (не менее 9 часов)	
<b>ИТОГО:</b>		18

### 3.6 Курсовой проект (работа), индивидуальное задание

Учебным планом выполнение курсового проекта (работы) и индивидуального задания не запланировано.

## 4 ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

### 4.1 Критерии и шкалы для интегрированной оценки уровня сформированности компетенций

#### *Составляющая компетенции – полнота знаний*

- нулевой уровень: неверные, не аргументированные, с множеством грубых ошибок ответы на вопросы. Уровень знаний ниже минимальных требований;
- минимальный уровень: даны не полные, неточные и неаргументированные ответы на вопросы. Допущено много грубых ошибок. Уровень знаний ниже минимальных требований;
- пороговый уровень: даны недостаточно полные, точные и аргументированные ответы на вопросы. Плохо знает термины, определения и понятия; основные закономерности, соотношения, принципы. Допущено много негрубых ошибок;
- средний уровень: даны достаточно полные, точные и аргументированные ответы на вопросы. В целом знает термины, определения и понятия; основные закономерности, соотношения, принципы. Допущено несколько негрубых ошибок;
- продвинутый уровень: даны полные, точные и аргументированные ответы на вопросы. Знает термины, определения и понятия; основные закономерности, соотношения, принципы. Допущено несколько негрубых ошибок;
- высокий уровень: даны полные, точные и аргументированные ответы на вопросы. Знает термины, определения и понятия; основные закономерности, соотношения, принципы. Допущено несколько неточностей.

#### *Составляющая компетенции – умения*

- нулевой уровень: полное отсутствие понимания сути методики решения задачи, допущено множество грубейших ошибок / задания не выполнены вообще;
- минимальный уровень: слабое понимание сути методики решения задачи, допущены грубые ошибки. Решения не обоснованы. Не умеет использовать нормативно-техническую литературу;
- пороговый уровень: достаточное понимание сути методики решения задачи, допущены ошибки. Решения не всегда обоснованы. Умеет использовать нормативно-техническую литературу. Слабо ориентируется в специальной научной литературе;
- средний уровень: в целом понимает суть методики решения задачи, допущены ошибки. Решения не всегда обоснованы. Умеет использовать нормативно-техническую и специальную научную литературу;
- продвинутый уровень: в целом понимает суть методики решения задачи, допущены неточности. Способен обосновать решения. Умеет использовать нормативно-техническую и специальную научную литературу;



– высокий уровень: понимает суть методики решения задачи. Способен обосновать решения. Умеет использовать нормативно-техническую и специальную научную литературу, передовой опыт.

#### *Составляющая компетенции – владение навыками*

- нулевой уровень: не демонстрирует владение навыками выполнения профессиональных задач. Не может выполнить задания;
- минимальный уровень: не демонстрирует владение навыками выполнения профессиональных задач. Испытывает существенные трудности при выполнении отдельных заданий;
- пороговый уровень: владеет навыками выполнения профессиональных задач на пороговом уровне. Задания выполняет медленно и некачественно;
- средний уровень: владеет навыками выполнения профессиональных задач. Задания выполняет на среднем уровне по скорости и качеству;
- продвинутый уровень: владеет уверенными навыками выполнения профессиональных задач. Быстро и качественно выполняет задания, иногда допуская незначительные погрешности;
- высокий уровень: владеет уверенными навыками выполнения профессиональных задач. Быстро и качественно выполняет задания, при необходимости демонстрируя творческий подход.

#### *Обобщенная оценка сформированности компетенций*

- нулевой уровень: на нулевом уровне сформированы: все составляющие; одна или две из трёх, остальные – на более высоком уровне;
- минимальный уровень: на минимальном уровне сформированы: все составляющие; одна или две из трёх, остальные – на более высоком уровне;
- пороговый уровень: на пороговом уровне сформированы: все составляющие; одна или две из трёх, остальные – на более высоком уровне;
- средний уровень: на среднем уровне сформированы: все составляющие; одна или две из трёх, остальные – на более высоком уровне;
- продвинутый уровень: на продвинутом уровне сформированы: все составляющие; одна или две из трёх, остальные – на высоком уровне;
- высокий уровень: на высоком уровне сформированы все составляющие компетенций.

## **4.2 Вопросы к экзамену и пример экзаменационного билета**

### **Вопросы к экзамену:**

1. Основные направления использования вычислительных технологий в химии.
2. Квантовая химия атома.
3. Квантовая химия молекул.
4. Блок-схема вычислительного процесса.

5. Поверхность потенциальной энергии. Понятие о стационарных точках.
6. Методы учета электронной корреляции (теория возмущения и метод конфигурационного взаимодействия).
7. Квантово-химические основы электронных и колебательных спектров.
8. Иерархия методов квантовой химии.
9. Неэмпирические методы расчета. Выбор базисных атомных функций. Номенклатура базисных наборов, их характеристика.
10. Характеристика программного пакета МОРАС.
11. Сформулируйте принцип суперпозиции полей, волн и т.д.
12. Почему математический аппарат квантовой механики использует операторы? Что называется оператором? Сформулируйте постулат об операторах.
13. Атомные орбитали (АО). Классификация АО.
14. Пространственная структура атомных орбиталей.
15. Свойства водородоподобного атома. Энергия АО. Расстояние между электроном и ядром.
16. Спектр водородоподобного атома.
17. Квантовые числа.
18. Многоэлектронные атомы. Вариационный принцип.
19. Вариационный метод Ритца.
20. Метод самосогласованного поля Хартри-Фока.
21. Свойства многоэлектронных атомов. Энергетические уровни.
22. Периодическая система элементов.
23. Потенциалы ионизации атомов.
24. Полные орбитальные и спиновые квантовые числа.
25. Спин-орбитальное взаимодействие.
26. Термы атомов в приближении спин-орбитального взаимодействия.
27. Спектры многоэлектронных атомов.
28. Приближение Борна-Оппенгеймера.
29. Метод молекулярных орбиталей.
30. Приближение линейной комбинации атомных орбиталей (МО ЛКАО).
31. Уравнения Рутаана.
32. Базисные наборы атомных орбиталей. Орбитали Слэтера-Зенера. Орбитали гауссова типа.
33. Минимальные базисные наборы STO-KG.
34. Валентно-расщепленные базисные наборы M-NPG.
35. Улучшение базисных наборов.
36. Электронная корреляция. Источники погрешности ССП МО ЛКАО расчетов.
37. Ограниченность однодетерминантного описания. Составляющие электронной корреляции.
38. Методы учета электронной корреляции.
39. Метод конфигурационного взаимодействия.
40. Теория возмущений.
41. Метод объединенных кластеров.
42. Сравнение различных методов учета корреляционной энергии.

43. Теория функционала плотности. Теорема Хоэнберга и Кона. Метод Кона-Шама.
44. Сравнение методов Хартри-Фока и Кона-Шама.
45. Вычислительные особенности DFT методов.
46. Полуэмпирические методы. Приближение нулевого дифференциального перекрывания.
47. Метод CNDO и параметризация CNDO/2.
48. Метод INDO и параметризация MINDO/3.
49. Метод NDDO.
50. Поверхность потенциальной энергии.
51. Оптимизация равновесной геометрии молекулы.
52. Программы для выполнения квантово-химических расчетов.
53. Программа GAMESS.
54. Программа Gaussian.
55. Программа HyperChem.
56. Программы-интерпретаторы результатов квантово-химических расчетов. ChemCraft.
57. Программы-интерпретаторы результатов квантово-химических расчетов. ViewMol3D.
58. Программы-интерпретаторы результатов квантово-химических расчетов. Алгоритм работы программы.
59. Моделирование динамики молекулярных систем. Метод молекулярной динамики.
60. Метод броуновского движения. Метод Монте-Карло.

**Пример экзаменационного билета:**

**ГОУВПО «ДОНЕЦКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ»**

Уровень высшего  
профессионального образования:  
Направление подготовки:  
Профиль:

*магистратура*

Семестр:  
Учебная дисциплина:

18.03.01 «Химическая технология»
«Химическая технология химико-фармацевтических препаратов и косметических средств»
<i>1-й</i>
<i>Теоретические методы в химии</i>

**БИЛЕТ № 1**

1. Основные направления использования вычислительных технологий в химии.
2. Свойства многоэлектронных атомов. Энергетические уровни.

Утверждено на заседании кафедры общей, физической и органической химии.

Протокол № \_\_\_\_ от \_\_\_\_ 20\_\_ г.

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_  
(подпись)

Экзаменатор \_\_\_\_\_  
(подпись)

**КРИТЕРИИ**  
**оценивания экзаменационной работы**  
**по дисциплине «Теоретические методы в химии»**  
**для обучающихся по направлению подготовки 18.04.01 «Химическая**  
**технология» профиля «Химическая технология химико-фармацевтических**  
**препаратов и косметических средств»**

Экзамен проводится письменно по билетам. Билет содержит 2 вопроса, каждый из которых требует конкретного ответа. Правильный ответ на вопрос оценивается в двадцать пять баллов. Если ответ не полный, то он оценивается в пятнадцать баллов. При отсутствии правильного ответа на поставленный вопрос обучающийся получает ноль баллов. Полученные баллы за ответы на вопросы билета суммируются и с учётом результатов текущего контроля работы студента выводится итоговая оценка по 100-балльной шкале.

По каждому вопросу:

– «25 баллов» – выставляется, если при ответе на вопрос студент обнаружил умение свободно, логично, четко и ясно предоставлять грамотные, правильные ответы на поставленный вопрос с использованием терминологии и символики в необходимой логической последовательности, а также сведений из других дисциплин и знаний, приобретенных ранее; твердые практические навыки с творческим применением полученных теоретических знаний; демонстрацию понимания причинно-следственных связей; умение использовать приобретенные знания и навыки в нестандартных ситуациях, требующих выхода на иной, более высокий уровень знаний; приведены аргументированные выводы;

– «15 баллов» – выставляется, если при ответе на вопрос студент обнаружил умение свободно формулировать правильные ответы на поставленные вопросы с использованием терминологии; наличие несущественных недостатков или нарушения последовательности изложения; слабое понимание причинно-следственных связей; незначительные недостатки или ошибки в изложении материала;

– «0 баллов» – выставляется, если при ответе на вопрос студент обнаружил незначительный общий объем знаний, отсутствие навыков в изложении теоретического материала, по различным темам дисциплины допустил принципиальные ошибки терминологического и фактологического характера.

Утверждено на заседании кафедры ОФОХ,

протокол № \_\_\_\_ от \_\_. \_\_. 20\_\_ г.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_ Волкова Е.И.

#### **4.3 Критерии оценивания**

Средствами оценивания являются:

- ведение конспекта;
- выполнение и защита практических работ;
- выполнение экзаменационной работы.

**Текущий контроль** знаний студентов производится по результатам ведения конспекта, работы на практических занятиях, а также во время контрольных опросов в ходе проведения занятий. Максимально возможное количество баллов за работу в семестре – 50 баллов (табл. 1).

Таблица 1 – Распределение баллов текущего контроля

№	Вид работы	Кол-во баллов	Сумма
1	Ведение конспекта	0,5·17	8
2	Выполнение практических работ	1·17	17
3	Защита лабораторных работ	1,5·17	25
	Итого:		50

**Промежуточная аттестация** по результатам освоения дисциплины в семестре проводится в форме семестрового экзамена. Форма проведения экзамена – письменная. Экзаменационный билет включает в себя 2 теоретических вопроса. При оценивании студента на экзамене преподаватель руководствуется критериями, приведенными в таблице 2.

Максимальное количество баллов за ответ на вопрос экзаменационного билета засчитывается студенту в случае, если ответ подтверждает владение студентом знаниями в полном объеме учебной программы, материал изложен в логической последовательности с выделением главного, содержит точные формулировки.

В случае если ответ на вопрос не в полной мере отвечает приведенным требованиям, студенту засчитывается количество баллов, равное 15. При отсутствии правильного ответа на поставленный вопрос студент получает 0 баллов.

Таблица 2 – Распределение баллов по семестровому экзамену

Форма контроля		Максимально возможное количество баллов
Ответ на вопросы экзаменационного билета	вопрос 1	25
	вопрос 2	25
<b>ИТОГО:</b>		<b>50</b>

**Итоговая оценка** определяется путем суммирования количества баллов по результатам текущего контроля и количества баллов по результатам семестрового экзамена. **Максимально возможное количество баллов – 100.**

Полученная оценка по 100-балльной шкале определяет оценку по государственной шкале и шкале ECTS:

Сумма баллов по 100-балльной шкале	Оценка по шкале ECTS	Оценка по государственной шкале
90-100	A	Зачтено
80-89	B	
75-79	C	
70-74	D	
60-69	E	
35-59	FX	Не зачтено
0-34	F*	

\* – с обязательным повторным изучением дисциплины.

#### 4.4 Пример текущего опроса на практических (семинарских) занятиях и лабораторных работах

Вопросы при защите практических работ:

1. Как в графической оболочке HyperChem создать молекулу?
2. Как в графической оболочке HyperChem обозначить связь между атомами?
3. Как в графической оболочке HyperChem провести оптимизацию геометрии молекулы с помощью методов молекулярной механики?
4. Как обработать файл отчета, полученный в графической оболочке HyperChem при оптимизации геометрии молекулы?
5. Как получить графическое изображение МО в HyperChem?
6. Как определить нуклеофильные и электрофильные свойства молекулы в HyperChem?
7. Как построить распределение электростатического потенциала и визуализировать неподеленные электронные пары?
8. Как провести квантово-химическое обоснование модели резонансных структур на основе расчетов в HyperChem?
9. Что называют поверхностью потенциальной энергии молекулы?
10. Чем отличается ППЭ реальной двухатомной молекулы от ППЭ механической модели «шариков, удерживаемых пружинкой»?
11. Чему равно общее число внутренних координат молекулы?
12. Почему «особые» точки ППЭ называют стационарными?
13. В чем состоит условие стационарности?
14. Какие стационарные точки ППЭ молекул представляют интерес в химии? Почему?
15. Как определить тип стационарной точки на ППЭ?
16. Что характеризует локальный минимум ППЭ?
17. Что характеризует глобальный минимум ППЭ?
18. Почему «седловая» стационарная точка получила такое название?
19. Отвечает ли переходное состояние максимуму ППЭ?
20. В чем суть приближения Борна–Оппенгеймера? Его роль в химии и границы применимости.
21. Запишите уравнение Шредингера для молекулы в приближении Борна–Оппенгеймера.
22. Что такое адиабатический потенциал?
23. Что представляет собой процесс оптимизации структуры молекулы?
24. Почему определение структуры переходного состояния молекулы более сложно, чем оптимизация геометрии стабильной молекулы?

#### 4.5 Курсовое проектирование

Учебным планом курсовое проектирование не запланировано.



## 5 РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

### I. Основная литература

1. Бутырская, Е. В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView / Е. В. Бутырская. — Москва : СОЛОН-ПРЕСС, 2017. — 224 с. — ISBN 978-5-91359-095-4. — Текст : электронный. — <https://www.iprbookshop.ru/90299.html>
2. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учеб. пособие для вузов / В. Г. Цирельсон. — М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. — 522 с. <https://studfile.net/preview/15929198/>

### II. Дополнительная литература

3. Блесман, А. И. Методы исследования наноматериалов : учебное пособие / А. И. Блесман, В. В. Даньшина, Д. А. Полонянкин. — Москва : Ай Пи Ар Медиа, 2023. — 79 с. — ISBN 978-5-4497-1978-2, 978-5-8149-2506-0. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: <https://www.iprbookshop.ru/128969.html>
4. Экспериментально-теоретические исследования быстропротекающих процессов : коллективная монография / И. А. Балаганский, Л. А. Мержиевский, А. В. Гуськов [и др.]. — Новосибирск : Новосибирский государственный технический университет, 2016. — 262 с. — ISBN 978-5-7782-2897-9. — Текст : электронный // Цифровой образовательный ресурс IPR SMART : [сайт]. — URL: <https://www.iprbookshop.ru/91587.html>

## 6 УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### Учебно-методические издания, разработанные в ДОННТУ:

5. Методические указания к практическим работам по курсу «Теоретические методы в химии» [Электронный ресурс]: для студентов по специальности 18.04.01 Химическая технология очной формы обучения / ГОУВПО «ДОННТУ», Каф. общей, физической и органической химии; сост.: В.Г. Матвиенко, Е.С. Карташинская - Электрон. дан. (1 файл: 548 Кб).- Донецк: ДОННТУ, 2023.- Систем. Требования: ZIP-архиватор. (доступ из личного кабинета студента)
6. Методические указания для самостоятельной работы по курсу «Теоретические методы в химии» [Электронный ресурс]: для студентов по специальности 18.04.01 Химическая технология очной формы обучения / ГОУВПО «ДОННТУ», Каф. общей, физической и органической химии; сост.: В.Г. Матвиенко, Е.С. Карташинская - Электрон. дан. (1 файл: 548 Кб).- Донецк: ДОННТУ, 2023.- Систем. Требования: ZIP-архиватор. (доступ из личного кабинета студента)

### Электронно-информационные ресурсы

ЭБС ДОННТУ – <http://donntu.ru/library>

## 7 МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

### 7.1 Лекционные занятия:

Учебная аудитория № 7.422, учебный корпус 7, для проведения занятий лекционного типа, семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации (мультимедийное оборудование: ноутбук; специализированная мебель: доска аудиторная, парты, демонстрационные стенды и плакаты. Windows XP Professional x64 (академическая подписка DreamSparkPremium), LibreOffice (бесплатная версия)).

### 7.2 Практические (семинарские) занятия:

Учебная лаборатория № 7.321, учебный корпус 7, для проведения лабораторных занятий, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации (мультимедийное оборудование: ноутбук; специализированная мебель: доска аудиторная, парты, демонстрационные стенды и плакаты; выпрямитель ВУП-2М (4 шт.), генератор звуковой ГЗМ (3 шт.), магазин сопротивления Р-14 (5 шт.), весы торсионные ВТ-100 (2 шт.), магнитная мешалка ММ-5 (7 шт.), манометры МО (4 шт.), плитка электрическая (4 шт.), лабораторная посуда, штативы лабораторные (5 шт.), шкаф сушильный, стол лабораторный, стол для приборов, шкаф лабораторный, шкаф вытяжной. Windows XP Professional x64 (академическая подписка DreamSparkPremium), LibreOffice (бесплатная версия)).

### 7.3 Самостоятельная работа:

Помещения для самостоятельной работы с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации: читальные залы, учебные корпуса 2, 3 (Компьютерная техника с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду (ЭИОС ДОННТУ) и электронно-библиотечную систему (ЭБС IPRbooks), а также возможностью индивидуального неограниченного доступа обучающихся в ЭБС и ЭИОС посредством Wi-Fi с персональных мобильных устройств. ОС – MicrosoftWindows 7, OpenOffice 2.0.3 – общественная лицензия MPL 2.0, GrubloaderforALTlinux – лицензия GNULGPLv3, MozillaFirefox – лицензия MPL2.0, Moodle (ModularObject-OrientedDynamicLearningEnvironment) – лицензия GNUGPL); James J P 2016 MOPAC2016, Version: 19.168W Stewart, Stewart Computational Chemistry, web-site: [HTTP://OpenMOPAC.net](http://OpenMOPAC.net); Chemcraft – graphical software for visualization of quantum chemistry computations. <http://www.chemcraftprog.com>; HyperChem 6.0 - лицензия GNUGPL.