

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный
университет им. Н.И. Лобачевского»

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО
решением ученого совета ННГУ
протокол от

Рабочая программа дисциплины

**МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ В ХИМИИ
ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ**

Уровень высшего образования

Специалитет

Направление подготовки / специальность

04.05.01 – Фундаментальная и прикладная химия

Направленность образовательной программы

Неорганическая химия

Форма обучения

Очная

Нижний Новгород
2022 год

Лист актуализации

Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

_____ 20__ г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 2022-2023 учебном году на заседании кафедры физической химии.

Протокол от _____ 20__ г. № ____

Зав. кафедрой _____

Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

_____ 20__ г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 20__ -20__ учебном году на заседании кафедры _____

Протокол от _____ 20__ г. № ____

Зав. кафедрой _____

Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

_____ 20__ г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 20__ -20__ учебном году на заседании кафедры _____

Протокол от _____ 20__ г. № ____

Зав. кафедрой _____

Визирование РПД для исполнения в очередном учебном году

Председатель МК

_____ 20__ г.

Рабочая программа пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 20__ -20__ учебном году на заседании кафедры _____

Протокол от _____ 20__ г. № ____

Зав. кафедрой _____

1. Место и цели дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина «Методы исследования в химии высоких энергий» относится к вариативной части Блока 1 ОПОП по направлению подготовки 04.05.01 – Фундаментальная и прикладная химия (Б1.В.03.ДВ.02.04), является дисциплиной по выбору для освоения студентами очной формы обучения, специализирующимися по кафедре физической химии, на четвертом году в 7 семестре.

Для освоения дисциплины «Методы исследования в химии высоких энергий» обучающиеся используют знания, умения и виды деятельности, сформированные в процессе изучения базовых дисциплин: «Высшая математика», «Общая физика», «Квантовая химия», «Органическая химия», «Физическая химия», «Численные методы и программирование»

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства
	Индикатор достижения компетенции* (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине**	
ПК-1-н. Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в области неорганической химии, и/или смежных с химией науках	ПК-1-н-1. Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий ПК-1-н-2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов	<i>Уметь</i> выбирать методы исследования в химии высоких энергий; использовать методы расчета молекул в возбужденных состояниях методами современной квантовой химии; оценивать результаты исследований с точки зрения химии высоких энергий <i>Знать</i> о современных квантово-химических методах расчетов физико-химических характеристик молекул в основных и возбужденных состояниях; об особенностях применения методов для расчета возбужденных состояний в фотохимии, спектроскопии и плазмохимии; о принципах построения	ФОС «Методы исследования в химии высоких энергий»

		<p>поверхностей потенциальной энергии молекул в различных электронных состояниях; о программном обеспечении для расчета молекул в возбужденных состояниях</p> <p><i>Владеть приемами работы на компьютерах с современными программными комплексами, позволяющими рассчитывать свойства молекул в возбужденных состояниях; приемами визуализации результатов квантово-химических расчетов молекул в возбужденных состояниях; приемами интерпретации результатов квантово-химических расчетов для получения новой химической информации в области химии высоких энергий</i></p>	
<p>ПК-2-н. Способен проводить информационные исследования в области неорганической химии и/или смежных с химией наук</p>	<p>ПК-2-н-1. Проводит поиск специализированной информации в информационных базах данных</p> <p>ПК-2-н-2. Анализирует и обобщает результаты поиска по тематике проекта в области неорганической химии и/или смежных с химией наук</p>	<p><i>Уметь осуществлять поиск химической информации о свойствах молекул в возбужденных состояниях и их реакциях, встречающихся в химии высоких энергий; систематизировать и анализировать информацию о химии высоких энергий; использовать специализированные базы знаний и базы данных в области химии высоких энергий</i></p> <p><i>Знать об особенностях химической информации в области химии высоких энергий; какие информационные</i></p>	<p>ФОС «Методы исследования в химии высоких энергий»</p>

		<p>(сетевые) ресурсы существуют в фотохимии, спектроскопии и плазмохимии, фотолинтографии</p> <p><i>Владеть</i> приемами работы в информационных сетях по поиску новой химической информации в области химии высоких энергий; приемами организации собственных хранилищ химической информации в области химии высоких энергий; приемами анализа результатов информационного поиска в химии высоких энергий</p>	
<p>ПК-3-н. Способен на основе критического анализа результатов НИР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в области неорганической химии и/или смежных с химией науках</p>	<p>ПК-3-н-1. Систематизирует информацию, полученную в ходе НИР, анализирует ее и сопоставляет с литературными данными</p> <p>ПК-3-н-2. Определяет возможные направления развития работ и перспективы практического применения полученных результатов</p>	<p><i>Уметь</i> проводить оценку результатов НИР в области химии высоких энергий, а именно результатов квантово-химических исследований свойств молекул в возбужденных электронных состояниях; проводить сравнение полученных результатов квантово-химических расчетов с литературными данными; правильно оформлять результаты квантово-химических расчетов в области химии высоких энергий; определять направления исследований с учетом полученных в ходе исследований</p> <p><i>Знать</i> о способах оценки результатов НИР в области химии высоких энергий, а именно результатов квантово-химических исследований молекул в возбужденных</p>	<p>ФОС «Методы исследования в химии высоких энергий»</p>

		<p>состояниях; о способах компьютерного поиска результатов исследования возбужденных состояний в научно-технической литературе и информационных сетях; о требованиях к оформлению результатов исследования возбужденных состояний квантово-химическими методами; о способах изменений направлений исследований в химии высоких энергий в зависимости от полученных результатов</p> <p><i>Владеть приемами оценки результатов НИР, а именно результатов квантово-химических расчетов возбужденных состояний; основами компьютерного поиска результатов исследования возбужденных состояний в научно-исследовательской литературе и информационных сетях; способами оформления результатов исследования возбужденных состояний квантово-химическими методами</i></p>	
<p>ПК-1-т. Способен определять способы, методы и средства решения технологических задач в рамках прикладных НИР в области неорганической химии</p>	<p>ПК-1-т-1. Готовит детальные планы отдельных стадий прикладных НИР</p> <p>ПК-1-т-2. Готовит документацию по подготовке, проведению и результатам прикладных НИР</p> <p>ПК-1-т-3. Предлагает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для</p>	<p><i>Знать</i> об использовании методов исследования в химии высоких энергий для совершенствования материалов и технологии изготовления микроэлектроники, проведения синтезов с использованием микрофлюидных технологий, получения приборов для диагностики в области медицины; о материалах для микролитографии</p>	<p>ФОС «Методы исследования в химии высоких энергий»</p>

	<p>решения поставленных задач в рамках прикладных НИР</p> <p>ПК-1-т-4. Проводит испытания инновационной продукции</p>	<p>(фото-, рентгеновской, электронной и ионной); о способах моделирования технологических процессов на основе химии высоких энергий; о принципах планирования прикладных НИР на основе результатов исследований методами химии высоких энергий</p> <p><i>Уметь</i> использовать результаты исследований в химии высоких энергий для поиска новых технологий и материалов; использовать методы химии высоких энергий для прогноза характеристик и свойств новых технологий и материалов; разрабатывать новые медицинские приборы с использованием методов микрофлюидики и плазмохимической обработки материалов</p> <p><i>Владеть</i> приемами деятельности по поиску прикладных решений на основе результатов, полученных в химии высоких энергий; основами изготовления приборов для микрофлюидных технологий; основами плазмохимической обработки материалов.</p>	
--	--	---	--

Окончательное завершение формирования компетенций, предусмотренных в рамках данной дисциплины, происходит при прохождении производственных практик и выполнения ВКР.

3. Структура и содержание дисциплины «Методы исследования в химии высоких энергий»

3.1 Трудоемкость дисциплины

	очная форма обучения
Общая трудоемкость	9 ЗЕТ
Часов по учебному плану	324
в том числе	
аудиторные занятия (контактная работа):	
- занятия лекционного типа	64
- занятия семинарского типа	64
-занятия лабораторного типа	96
-КСИРФ	2
самостоятельная работа	62
Промежуточная аттестация – экзамен	36

3.2. Структура дисциплины

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины	Всего (часы)		в том числе									
			Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы								Самостоятельная работа обучающегося, часы	
			из них									
	Очная	Очно-заочная	Занятия лекционного типа		Занятия семинарского типа		Занятия лабораторного типа		Всего			
Очная			Очно-заочная	Очная	Очно-заочная	Очная	Очно-заочная	Очная	Очно-заочная	Очная	Очно-заочная	
Тема 1. Многоэлектронная проблема в квантовой химии.	18		8		—		—		8		10	
Тема 2. Приближение МО ЛКАО.	40		8		10		16		34		6	
Тема 3. Применение теории групп для классификации возбужденных состояний.	20		6		8		—		14		6	

Тема 4. Фотофизические процессы.	36		6		8		16		30		6	
Тема 5. Современные методы расчета молекул с учетом статической и динамической корреляции электронов в молекулах.	40		8		10		16		34		6	
Тема 6. Особенности расчета возбужденных состояний органических молекул при помощи методов современной квантовой химии.	44		8		10		16		34		10	
Тема 7. Туннельный эффект в фотохимических процессах.	40		8		10		16		34		6	
Тема 8. Нестационарная теория возмущений.	20		6		8		—		14		6	
Тема 9. Применение квантовой химии для изучения механизмов фотохимических реакций.	28		6		—		16		22		6	
КСИРФ	2											
Промежуточная аттестация – экзамен	36											
Итого	324		64		64		96		224		62	

Промежуточный контроль осуществляется при проведении экзамена.

3.3. Содержание разделов дисциплины

Тема 1. Многоэлектронная проблема в квантовой химии.

Многоэлектронный атом. Сложение моментов количества движения в многоэлектронных атомах. Атомные термы. Мультиплетные состояния. Волновая функция многоэлектронной системы. Квантово-механическая формулировка принципа Паули. Вариационный принцип. Уравнения Хартри-Фока. Возбужденные состояния атома.

Тема 2. Приближение МО ЛКАО.

Принцип Борна-Оппенгеймера. Молекулярные орбитали. Понятие об адиабатическом приближении. Поверхности потенциальной энергии – преимущества и недостатки теоретических моделей, использующих эту концепцию.

Двухатомные молекулы. Классификация молекулярных орбиталей на основе молекулярных квантовых чисел. Связывающие, несвязывающие и разрыхляющие молекулярные орбитали.

Молекулярные термы. Описание возбужденных состояний двухатомных молекул. Классификация Каша. Основные свойства возбужденных состояний ($\pi\pi^*$)-, ($n\pi^*$)-, ($\sigma\sigma^*$)- и ($n\sigma^*$)-типа. Различие в их фотофизических и фотохимических свойствах. Методологическое значение этой классификации.

Методологическое значение понятия валентности для описания возбужденных состояний. Метод дельта-матриц Циммермана. Гибридизация и геометрическое строение молекул. Изменение гибридизации атомов в возбужденных состояниях молекул.

Полуэмпирические методы расчетов с использованием уравнений Хартри-Фока-Руутаана. Проблема многоцентровых интегралов. Приближение нулевого дифференциального перекрытия. Простейший π -электронный метод Хюккеля.

Тема 3. Применение теории групп для классификации возбужденных состояний.

Правила сохранения элементов симметрии в фотохимических реакциях. Правила корреляции. Оценка величин интегралов дипольных моментов перехода с использованием методов теории групп.

Тема 4. Фотофизические процессы.

Диаграмма Яблонского. Основные фотофизические процессы с участием возбужденных состояний. Флуоресценция: связь квантовых выходов флуоресценции с химическим строением молекул. Фосфоресценция. О роли триплетных состояний. Внутренняя конверсия. Интеркомбинационная конверсия. Факторы, влияющие на интеркомбинационную конверсию. Колебательная релаксация. Перенос энергии между молекулами в возбужденном и основном состояниях.

Тема 5. Современные методы расчета молекул с учетом статической и динамической корреляции электронов в молекулах.

Методы теории возмущений. Теоремы Кона. Методы функционала матрицы плотности. Различные виды потенциалов.

Тема 6. Особенности расчета возбужденных состояний органических молекул при помощи методов современной квантовой химии.

Важность учета корреляции электронов. Применение методов с учетом взаимодействия конфигураций. Метод CIS. Применение время-зависимого Гамильтониана. Метод TD DFT.

Трудности, связанные с выбором размера активного пространства и способы их преодоления при расчете возбужденных состояний органических молекул. Метод CASSCF: его успехи и неудачи в описании фотохимических реакций.

Тема 7. Туннельный эффект в фотохимических процессах.

Квазиклассическое приближение в квантовой химии. Туннельный эффект. Теория туннельного переноса электрона, протона и атома водорода. Значение ее для современной фотохимии. Подбарьерные кинетические процессы. Работы акад. Гольданского.

Тема 8. Нестационарная теория возмущений.

Теория коэффициентов А и В Эйнштейна. Разложение возмущающего члена на дипольный, спин-орбитальный, квадрупольный и т.п. вклады.

Тема 9. Применение квантовой химии для изучения механизмов фотохимических реакций.

Описание органических молекул при помощи квантовой химии. Понятие об электронной и спиновой плотности на атомах молекулы, порядках связей, индексах свободной энергии, потенциалах ионизации молекулярных систем.

Применение квантовой химии в спектроскопии и фотохимии. Электронные спектры поглощения. Флуоресценция, фосфоресценция, перенос энергии электронного возбуждения.

Расчет интегралов дипольного момента перехода между различными электронными состояниями органических молекул – основа для создания правил отбора в фотофизических и фотохимических процессах.

Индексы реакционной способности и особенности использования их для предсказания реакционной способности органических соединений в фотохимических реакциях.

Метод фронтальных молекулярных орбиталей, как основа для изучения окислительно-восстановительных реакций органических соединений. Комплексы с переносом заряда и их роль в фотохимии.

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа студентов включает работу в читальном зале библиотеки, в учебных кабинетах (лабораториях) и в домашних условиях, с доступом к ресурсам Интернет для подготовки к устному опросу.

К форме текущего контроля успеваемости дисциплины относится **экзамен**.

5. Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю), включающий

5.1. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине

Промежуточный контроль качества усвоения студентами содержания дисциплины проводится в виде комплексного экзамена, на котором определяются:

- уровень усвоения студентами основного учебного материала по дисциплине;
- уровень понимания студентами изученного материала;
- способности студентов использовать полученные знания для решения конкретных задач

Уровень сформированности компетенций (индикатора достижения компетенций)	Шкала оценивания сформированности компетенций						
	плохо	неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	очень хорошо	отлично	превосходно
	Не зачтено		зачтено				
<u>Знания</u>	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от ответа	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки.	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок.	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько незначительных ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок.	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки.
<u>Умения</u>	Отсутствие минимальных умений . Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки.	Продemonстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания но не в полном объеме.	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продemonстрированы все основные умения. Решены все основные задачи . Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами.	Продemonстрированы все основные умения, решены все основные задачи с отдельными незначительными недочетами, выполнены все задания в полном объеме.	Продemonстрированы все основные умения,. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов
<u>Навыки</u>	Отсутствие владения материалом. Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки.	Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторыми недочетами	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами	Продemonстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов.	Продemonстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов.	Продemonстрирован творческий подход к решению нестандартных задач

5.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения.

5.2.1 Контрольные вопросы

<i>Вопросы</i>	<i>Код формируемой компетенции</i>
1. Предмет квантовой химии. Основные этапы ее развития.	ПК-1-н
2. Многоэлектронная проблема в квантовой химии	ПК-1-н
3. Описание многоэлектронного атома в рамках квантовой химии.	ПК-1-н
4. Сложение моментов количества движения в многоэлектронных атомах.	ПК-1-н
5. Волновая функция многоэлектронной системы. Квантово-механическая формулировка принципа Паули.	ПК-1-н
5. Вариационный принцип.	ПК-1-н
6. Уравнения Хартри-Фока.	ПК-1-н
7. Возбужденные состояния атома.	ПК-1-н
8. Принцип Борна-Оппенгеймера.	ПК-1-н
9. Молекулярные орбитали.	ПК-1-н
10. Понятие об адиабатическом приближении.	ПК-1-н
11. Поверхности потенциальной энергии – преимущества и недостатки теоретических моделей, использующих эту концепцию.	ПК-3-н
12. Классификация молекулярных орбиталей на основе молекулярных квантовых чисел. Связывающие, несвязывающие и разрыхляющие молекулярные орбитали.	ПК-2-н
13. Двухатомные молекулы. Метод молекулярных диаграмм. Его использование в химии высоких энергий.	ПК-1-т.
14. Молекулярные термы. Описание возбужденных состояний двухатомных молекул	ПК-3-н.
15. Классификация Каша. Основные свойства возбужденных состояний ($\pi\pi^*$)-, ($\pi\pi^*$)-, ($\sigma\sigma^*$)- и ($\pi\sigma^*$)-типа. Различие в их фотофизических и фотохимических свойствах. Методологическое значение этой классификации.	ПК-2-н
16. Методологическое значение понятия валентности для описания возбужденных состояний. Метод дельта-матриц Циммермана.	ПК-1-н
17. Гибридизация и геометрическое строение молекул. Изменение гибридизации атомов в возбужденных состояниях молекул.	ПК-3-н
18. Приближение МО ЛКАО. Уравнения Хартри-Фока-Руутаана. Методологическое значение этого приближения.	ПК-2-н
19. Правила сохранения элементов симметрии в фотохимических реакциях. Правила корреляции.	ПК-2-н
20. Диаграмма Яблонского. Основные фотофизические процессы с участием возбужденных состояний.	ПК-3-н.
21. Оценка величин интегралов дипольных моментов перехода с использованием методов теории групп.	ПК-1-н
22. Флуоресценция: связь квантовых выходов флуоресценции с химическим строением молекул. Фосфоресценция. О роли триплетных состояний.	ПК-1-т
23. Внутренняя конверсия. Интеркомбинационная конверсия. Факторы, влияющие на интеркомбинационную конверсию.	ПК-2-н

Колебательная релаксация.	
24. Перенос энергии между молекулами в возбужденном и основном состояниях.	ПК-3-н
25. Современные методы расчета органических молекул с учетом статической и динамической корреляции электронов в молекулах.	ПК-1-т.
26. Методы теории возмущений для изучения возбужденных состояний.	ПК-1-н
27. Теоремы Кона. Методы функционала матрицы плотности. Различные виды потенциалов.	ПК-1-н
28. Применение метода DFT для расчета возбужденных состояний.	ПК-2-н
29. Особенности расчета возбужденных состояний органических молекул при помощи методов современной квантовой химии.	ПК-2-н
30. Важность учета корреляции электронов при расчете свойств молекул в возбужденных состояниях. Статическая и динамическая корреляция.	ПК-1-н
31. Применение методов с учетом взаимодействия конфигураций. Методы CIS.	ПК-1-т
32. Применение время-зависимого Гамильтониана. Метод TD DFT.	ПК-1-н
33. Трудности, связанные с выбором размера активного пространства и способы их преодоления при расчете возбужденных состояний органических молекул. Метод CASSCF: его успехи и неудачи в описании фотохимических реакций.	ПК-1-н
34. Понятие о молекулярных термах.	ПК-2-н
35. Туннельный эффект в фотохимических процессах. Квазиклассическое приближение в квантовой химии.	ПК-1-т
36 Туннельный эффект. Теория туннельного переноса электрона, протона и атома водорода. Значение ее для современной фотохимии. Подбарьерные кинетические процессы. Работы акад. Гольданского.	ПК-1-н
37. Нестационарная теория возмущений.	ПК-1-н
38. Теория коэффициентов А и В Эйнштейна для описания динамики возбужденных состояний.	ПК-3-н
39. Разложение возмущающего члена в нестационарной теории возмущений на дипольный, спин-орбитальный, квадрупольный и т.п. вклады.	ПК-1-н
40. Применение квантовой химии для изучения механизмов фотохимических реакций.	ПК-2-н
41. Описание возбужденных молекул при помощи квантовой химии.	ПК-2-н
42. Понятие об электронной и спиновой плотности на атомах молекулы, порядках связей, индексах свободной энергии, потенциалах ионизации молекулярных систем.	ПК-3-н
43. Применение квантовой химии в фотохимии и спектроскопии.	ПК-1-т
44. Метод поверхностей потенциальной энергии. Применение его для описания процессов в химии высоких энергий.	ПК-3-н
45. Электронные спектры поглощения. Флуоресценция, фосфоресценция, перенос энергии электронного возбуждения как методы исследования в химии высоких энергий.	ПК-2-н
46. Расчет интегралов дипольного момента перехода между	ПК-2-н

различными электронными состояниями органических молекул – основа для создания правил отбора в фотофизических и фотохимических процессах.	
47. Индексы реакционной способности и особенности использования их для предсказания реакционной способности органических соединений в фотохимических реакциях.	ПК-1-т
48. Метод фронтальных молекулярных орбиталей, как основа для изучения окислительно - восстановительных реакций органических соединений.	ПК-3-н.
49. Комплексы с переносом заряда и их роль в фотохимии. Особенности их описания при помощи методов квантовой химии.	ПК-1-т.
50. Квантовая химия как методологическая основа плазмохимических реакций	ПК-2-н

5.2.2. Типовые тестовые задания для оценки сформированности компетенции ПК-1-н

Задание 1. Охарактеризуйте наиболее подходящие для Химии высоких энергий методы вычислительной квантовой химии.

Задание 2. Охарактеризуйте наиболее подходящие для расчета возбужденных состояний программные комплексы квантовой химии.

Задание 3. Опишите выбор активного пространства в методе CASSCF при расчете возбужденных состояний.

Задание 4. Опишите особенности кинетики фотохимических реакций.

Задание 5. Охарактеризуйте использование теоретических методов химии высоких энергий для прогнозирования свойств фоторезистных масок.

Задание 6. Опишите алгоритм исследования механизма фотохимической реакции методами квантовой химии.

Задание 7. Опишите алгоритм исследования механизма плазмохимической реакции методами квантовой химии.

5.2.3. Типовые задания/задачи для оценки сформированности компетенции ПК-2-н

Задание 1. Охарактеризуйте вычислительные средства, нашедшие применение в Химии высоких энергий.

Задание 2. Охарактеризуйте наиболее подходящие для расчета возбужденных состояний программные комплексы квантовой химии.

Задание 3. Опишите выбор активного пространства в методе CASSCF при расчете возбужденных состояний.

Задание 4. Опишите особенности кинетики фотохимических реакций.

Задание 5. Охарактеризуйте использование теоретических методов химии высоких энергий для прогнозирования свойств фоторезистных масок.

Задание 6. Опишите алгоритм исследования механизма фотохимической реакции методами квантовой химии.

Задание 7. Опишите алгоритм исследования механизма плазмохимической реакции методами квантовой химии.

5.2.4. Типовые задания/задачи для оценки сформированности компетенции ПК-3-н

Задание 1. Опишите применение методов химии высоких энергий в физической химии.

Задание 2. Опишите применение методов химии высоких энергий в органической химии.

Задание 3. Опишите применение методов химии высоких энергий в неорганической химии.

Задание 4. Опишите применение методов химии высоких энергий в биологии.

5.2.5. Типовые задания/задачи для оценки сформированности компетенции ПК-3-н

Задание 1. Опишите применение методов химии высоких энергий в медицинской химии.

Задание 2. Опишите применение методов химии высоких энергий в микроэлектронике.

Задание 3. Опишите применение методов химии высоких энергий в технологии микрореакторов.

Задание 4. Опишите применение методов химии высоких энергий в материаловедении.

Задание 5. Опишите применение методов химии высоких энергий в модификации материалов при помощи газовой плазмы.

Задание 6. Применение методов химии высоких энергий в плазмохимическом синтезе.

5.2.6. Темы курсовых работ, эссе, рефератов

1. Применение методов квантовой химии для описания фотохимических реакций.

2. Применение методов квантовой химии для описания плазмохимических реакций.

3. Применение методов квантовой химии для описания фотофизических процессов.

4. Особенности применения метода поверхности потенциальной энергии для описания фотохимических реакций.

5. Особенности моделирования фотохимической кинетики.

6. Особенности моделирования плазмохимической кинетики.

7. Проявление туннельного эффекта в химии высоких энергий.

8. Квантово-химическое описание молекул в возбужденных состояниях.

9. Применение методов химии высоких энергий для изготовления изделий микроэлектроники.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Теоретическая подготовка к лабораторным занятиям и промежуточной аттестации может осуществляться по следующим литературным источникам:

6.1. Основная литература

1. Дж. Бартроп, Дж. Койл, Возбужденные состояния в органической химии. М. Мир. 1978. 446 с.

2. В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. Теория строения молекул. Ростов-на-Дону. Феникс.1997. 560 с.

3. Л.А. Грибов, С.П. Муштакова. Квантовая химия. М. Юрист-Гардарика.1999.

4. Т. Кларк. Компьютерная химия. М.Мир.1990.

5. И.В. Абаренков, В.Ф. Братцев, А.В. Тулуб. Начала квантовой химии. М. Высшая школа. 1989.

6. С.В. Зеленцов. Введение в современную квантовую химию Учебное пособие. Н. Новгород, ННГУ, 2006.

7. С.В. Зеленцов. Введение в фотохимию. Учебное пособие. Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского государственного университета, 2006. 183с.

8. С.В. Зеленцов. Фотохимические реакции органических соединений. Учебное пособие. Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского государственного университета, 2007. 188с.

9. Н.Ф. Степанов. Квантовая механика и квантовая химия. М.Мир, 2001. 519с.

10. Х. Окабе. Фотохимия малых молекул М. Мир, 1981. 504 с.

6.2. Дополнительная литература

1. Л. Цюлик. Квантовая химия: Учеб.пособие.М.:Мир. 1976.Т.1.512 с.

2. Введение в квантовую химию/ Под ред. А.М.Бродского. М.:Мир, 1982. 264 с.
3. К.С. Краснов. Молекулы и химическая связь: Учеб.пособие.2-еизд., перераб.и допол.М.:Вышш.шк., 1984.275 с.
4. Полуэмпирические методы расчета электронной структуры: В 2 т./Под.ред. Дж. Сигала.М.: Мир,1980. Т.1., гл.1,2.
5. С. Фудзинага. Метод молекулярных орбиталей. М.: Мир, 1983.461 с.
6. Т. Пикок. Электронные свойства ароматических и гетероциклических молекул. М.Мир.1969.
8. Р. Фларри. Квантовая химия.М.Мир.1985
9. Р. Мак-Вини, Б. Сатклиф, Квантовая механика молекул, М. Мир, 1972. 380 с

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, 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 образования (ФГОС) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины может быть найдена в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой также 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.

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Для обучения студентов названной дисциплине имеются в наличии специальные кабинеты с необходимым оборудованием (105а, ауд. 308, 306-б, 5 корпус). Материально-техническое обеспечение лекционных занятий: видеопроектор, ноутбук, переносной экран, проектор, доска, бумага формата А0, фломастеры.

Имеется вычислительный кластер (к.306б), на котором установлены программы для проведения вычислительных работ: Gamess (свободно распространяемая), NWChem (свободно распространяемая), Avogadro (свободно распространяемая). Имеется лицензионная программа Gaussian-03. Имеется выход в сеть Интернет. Имеется доступ на суперкомпьютер «Лобачевский», на котором установлены программные комплексы NWChem (свободно распространяемая программа), Avogadro (свободно распространяемая программа).

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ВО ННГУ. Приказ ННГУ от 13.05.2020г. № 275-ОД «О введении в действие образовательного стандарта высшего образования – специалитет по специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»

Автор:

_____ д.х.н., доцент С.В. Зеленцов

Рецензент:

_____ д.х.н., профессор РАН Федоров А.Ю.

Заведующий кафедрой физической химии:

_____ д.х.н., профессор А.В. Маркин