

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 президиума Ученого совета ННГУ

протокол № 1 от 16.01.2024 г.

**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

---

г. Нижний Новгород

2024 год начала подготовки

## 1. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина Б1.В.03.ДВ.02.04 Методы исследования в химии высоких энергий относится к части, формируемой участниками образовательных отношений образовательной программы.

## 2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

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	Для текущего контроля успеваемости	Для промежуточной аттестации
ПК-1-н: Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии и/или смежных с химией науках	ПК-1-н-1: Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР. ПК-1-н-2: Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР.	ПК-1-н-1: Умеет 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.  Знает 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 поверхностей потенциальной энергии молекул в различных электронных состояниях; о программном обеспечении для расчета молекул в возбужденных состояниях  Владеет приемами работы на компьютерах с современными программными комплексами, позволяющими рассчитывать свойства молекул в возбужденных состояниях;	Задания	Экзамен: Контрольные вопросы

		<p>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</p> <p>ПК-1-н-2: Уметь 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</p> <p>Знать 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 поверхностей потенциальной энергии молекул в различных электронных состояниях; о программном обеспечении для расчета молекул в возбужденных состояниях</p> <p>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-</p>		
--	--	--	--	--

		химических расчетов для получения новой химической информации в области химии высоких энергий		
ПК-1-т: Способен определять способы, методы и средства решения технологических задач в рамках прикладных НИР в выбранной области химии	<p>ПК-1-т-1: Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных).</p> <p>ПК-1-т-2: Проводит анализ информации по заданной тематике и проводит ее обзор</p>	<p>ПК-1-т-1:</p> <p>Знает:</p> <p>о современных методах поиска новой информации по химии высоких энергий в сети Интернет, о особенностях поиска релевантной информации с использованием системы GOOGLE</p> <p>Умеет подбирать оптимальный набор ключевых слов для эффективного поиска информации в области химии высоких энергий</p> <p>Владеет языком составления поисковых запросов в области химии высоких энергий, аппаратуры и методов для успешной работы в области химии высоких энергий и ее применений</p> <p>ПК-1-т-2:</p> <p>Знает основные законы химии высоких энергий, о ее применениях в области органического синтеза, получения материалов для микроэлектроники, применения химии высоких энергий для решения задач экологии. Знает об обработке информационных потоков, а также об основах анализа механизмов фотохимических реакций.</p> <p>Умеет редактировать тексты при помощи компьютерного редактирования информационных текстов.</p> <p>Владеет основами обработки информации в области химии высоких энергий, а также ее</p>	Задания	Экзамен: Контрольные вопросы

		применений.		
ПК-2-н: Способен проводить информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных с химией науках	<p>ПК-2-н-1: Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных).</p> <p>ПК-2-н-2: Проводит анализ информации по заданной тематике и проводит ее обзор</p>	<p>ПК-2-н-1:</p> <p>Знать особенности информационных потоков в химии и химической технологии, а также алгоритмы поиска новой химической информации на компьютерах в сети Интернет.</p> <p>Уметь проводить сбор и предварительный анализ новой химической информации, проводить оценку релевантности получаемой информации.</p> <p>Владеть алгоритмами поиска информации в сети Интернет по тематике методов исследования в области химии высоких энергий.</p> <p>ПК-2-н-2:</p> <p>Знать основные приемы разработки и написания литературных обзоров по методологии проведения исследований в области химии высоких энергий.</p> <p>Уметь проводить оценку релевантности и значимости полученной информации о системности исследований в области химии высоких энергий.</p> <p>Владеть навыками грамотного и структурированного изложения новых информационных сообщений в области химии высоких энергий.</p>	Задания	Экзамен: Контрольные вопросы
ПК-3-н: Способен на основе критического анализа результатов НИР	ПК-3-н-1: Оценивает перспективы применения информации о химии высоких энергий для разработки на ее основе	ПК-3-н-1: Знать основные положения современной химии высоких энергий, а также о наиболее важных технологических	Задания	Экзамен: Контрольные вопросы

оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии и/или смежных с химией науках	новых методов и материалов ПК-3-н-2: Создает и обосновывает рабочие планы по проведению исследований в области химии высоких энергий	<p>вызовах в области новых методов и материалов для высокотехнологических областей промышленности.</p> <p>Уметь оценивать перспективы применения новой информации о химии высоких энергий для создания новых направлений химической науки и технологии.</p> <p>Владеть основами научного анализа новой информации в области химии высоких энергий, прежде всего в области практического использования для создания новых материалов и технологий</p> <p>ПК-3-н-2: Знать об основных достижениях современной химии высоких энергий, а также о методах исследований, наиболее эффективных в этой области химии.</p> <p>Уметь критически осмысливать результаты проведенных исследований в области химии высоких энергий и оценивать вероятность получения новой химической информации при продолжении научных исследований</p> <p>Владеть приемами критического анализа результатов экспериментальных и теоретических исследований и оценки их научной значимости.</p>		
---	---	--	--	--

### 3. Структура и содержание дисциплины

#### 3.1 Трудоемкость дисциплины

	очная
--	-------

<b>Общая трудоемкость, з.е.</b>	<b>9</b>
<b>Часов по учебному плану</b>	<b>324</b>
в том числе	
<b>аудиторные занятия (контактная работа):</b>	
- занятия лекционного типа	<b>64</b>
- занятия семинарского типа (практические занятия / лабораторные работы)	<b>160</b>
- КСР	<b>2</b>
<b>самостоятельная работа</b>	<b>26</b>
<b>Промежуточная аттестация</b>	<b>72</b>
	<b>Экзамен</b>

### 3.2. Содержание дисциплины

(структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий)

Наименование разделов и тем дисциплины	Всего (часы)	в том числе			
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них			Самостоятельная работа обучающегося, часы
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа (практические занятия/ лабора- торные работы), часы	Всего	
	о ф о	о ф о	о ф о	о ф о	о ф о
Тема 1. Многоэлектронная проблема в квантовой химии	22	4	15	19	3
Тема 2. Приближение МО ЛКАО.	20	4	14	18	2
Тема 3. Применение теории групп для классификации возбужденных состояний.	25	6	16	22	3
Тема 4. Фотофизические процессы.	34	6	25	31	3
Тема 5. Современные методы расчета молекул с учетом статической и динамической корреляции электронов в молекулах.	27	4	20	24	3
Тема 6. Особенности расчета возбужденных состояний органических молекул при помощи методов современной квантовой химии.	29	11	15	26	3
Тема 7. Туннельный эффект в фотохимических процессах.	24	6	15	21	3
Тема 8. Нестационарная теория возмущений.	26	8	15	23	3
Тема 9. Применение квантовой химии для изучения механизмов фотохимических реакций.	43	15	25	40	3
Аттестация	72				
КСР	2				2
Итого	324	64	160	226	26

### Содержание разделов и тем дисциплины

Тема 1. Многоэлектронная проблема в квантовой химии.

Возбужденные состояния как объекты квантово-химических исследований многоэлектронных систем.

Теория локализации и делокализации электронов. Основные методы классификации возбужденных состояний при помощи квантовой химии. Приближение Хартри-фока - основа современной многоэлектронной теории атомов и молекул.

Тема 2. Приближение МО ЛКАО. Причины и следствия появления приближения представления молекулярных орбиталей в виде линейной комбинации атомных орбиталей. Использование этого приближения для конкретизации и описания механизмов фотохимических реакций.

Тема 3. Применение теории групп для классификации возбужденных состояний. Классификация возбужденных состояний по неприводимым представлениям группы их симметрии - основная классификация возбужденных состояний атомов и молекул. Молекулярные и атомные термы. Связь фотохимии и молекулярных термов частиц, участвующих в фотофизическом или фотохимическом процессе. Преимущества и недостатки такой классификации.

Тема 4. Фотофизические процессы. Теоретическое описание процессов перехода молекул и атомов в возбужденное состояние, флуоресценции и фосфоресценции, интеркомбинационной и внутренней конверсии и также переноса энергии возбуждения - основной метод современной химии высоких энергий.

Тема 5. Современные методы расчета молекул с учетом статической и динамической корреляции электронов в молекулах. Их особенности, преимущества и недостатки. Проблема учета корреляции в современной квантовой химии молекул и атомов в основном и возбужденном состояниях.

Тема 6. Особенности расчета возбужденных состояний органических молекул при помощи методов современной квантовой химии. Основные методы расчета возбужденных состояний в современной квантовой химии: TD DFT и CASSCF. Их преимущества и недостатки.

Тема 7. Туннельный эффект в фотохимических процессах. Перенос электрона, перенос атома водорода, кислорода, хлора и т.п. - основные проявления явления туннельного переноса в квантовой химии.

Методы теоретического описания туннельного эффекта.

Тема 8. Нестационарная теория возмущений. Формула Эйнштейна и ее применение в современной химии возбужденных состояний.

Метод "управляющих уравнений" - основа кинетического описания современной химии высоких энергий. Теоретическое описание явлений внутренней конверсии и интеркомбинационной конверсии.

Тема 9. Применение квантовой химии для изучения механизмов фотохимических реакций. Метод поверхностей потенциальной энергии и его использование в фотохимии. Примеры успешного применения этого метода для описания механизмов химии высоких энергий.

Тема 7. Туннельный эффект в фотохимических процессах.

Тема 8. Нестационарная теория возмущений.

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

Практические занятия /лабораторные работы организуются, в том числе, в форме практической подготовки, которая предусматривает участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью.

На проведение практических занятий / лабораторных работ в форме практической подготовки отводится: очная форма обучения - 48 ч.

#### **4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся**

Самостоятельная работа обучающихся включает в себя подготовку к контрольным вопросам и заданиям для текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины приведенным в п. 5.

С.В. Зеленцов. Экспериментальные и теоретические методы изучения возбужденных состояний: Учебно-методические материалы по программе повышения квалификации «Физико-химические основы

нанотехнологий». - Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского - Нижний Новгород, 2007, - 78 с. - <http://www.unn.ru/pages/issues/aids/2007/77.pdf>  
Плехович С.Д., Зеленцов С.В. Применение программы Gaussian для расчета молекул возбужденном состоянии.- Н.Новгород: Издательство ННГУ. 2023. - 23 с.

## **5. Фонд оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)**

### **5.1 Типовые задания, необходимые для оценки результатов обучения при проведении текущего контроля успеваемости с указанием критериев их оценивания:**

#### **5.1.1 Типовые задания (оценочное средство - 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.

#### **5.1.2 Типовые задания (оценочное средство - Задания) для оценки сформированности компетенции ПК-1-г:**

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.

#### **5.1.3 Типовые задания (оценочное средство - Задания) 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.

#### **5.1.4 Типовые задания (оценочное средство - Задания) 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.

#### **Критерии оценивания (оценочное средство - Задания)**

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	задание по курсу выполнено полностью и представлено в надлежащий срок
не зачтено	задание по курсу не выполнено полностью и/или не представлено в надлежащий срок

#### **5.2. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине при промежуточной аттестации**

##### **Шкала оценивания сформированности компетенций**

Уровень сформированности компет	плохо	неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	очень хорошо	отлично	превосходно
---------------------------------	-------	---------------------	-------------------	--------	--------------	---------	-------------

енций (индик атора достиж ения компет енций)	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 несущественных ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Ошибок нет.	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 отдельным и несущественными 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 базовых навыков. 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

### Шкала оценивания при промежуточной аттестации

Оценка		Уровень подготовки
зачтено	<b>превосходно</b>	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «превосходно», продемонстрированы знания, умения, владения по соответствующим компетенциям на уровне выше предусмотренного программой
	<b>отлично</b>	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично».

	<b>очень хорошо</b>	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо»
	<b>хорошо</b>	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо».
	<b>удовлетворительно</b>	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «удовлетворительно», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «удовлетворительно»
<b>не зачтено</b>	<b>неудовлетворительно</b>	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно».
	<b>плохо</b>	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

### 5.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения на промежуточной аттестации с указанием критериев их оценивания:

#### 5.3.1 Типовые задания (оценочное средство - Контрольные вопросы) для оценки сформированности компетенции ПК-1-н

1. Предмет квантовой химии. Основные этапы ее развития.
2. Многоэлектронная проблема в квантовой химии
3. Описание многоэлектронного атома в рамках квантовой химии.
4. Сложение моментов количества движения в многоэлектронных атомах.
5. Волновая функция многоэлектронной системы. Квантово-механическая формулировка принципа Паули.
6. Вариационный принцип.
7. Уравнения Хартри-Фока.
8. Возбужденные состояния атома.
9. Принцип Борна-Оппенгеймера.
10. Молекулярные орбитали.
11. Понятие об адиабатическом приближении.
12. Методологическое значение понятия валентности для описания возбужденных состояний. Метод дельта-матриц Циммермана.
13. Методы теории возмущений для изучения возбужденных состояний.
14. Теоремы Кона. Методы функционала матрицы плотности. Различные виды потенциалов.

15. Применение время-зависимого Гамильтониана. Метод TD DFT.

16. 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.

17. Нестационарная теория возмущений.

18. Разложение возмущающего члена в нестационарной теории возмущений на дипольный, спин-орбитальный, квадрупольный и т.п. вклады.

### **5.3.2 Типовые задания (оценочное средство - Контрольные вопросы) для оценки сформированности компетенции ПК-1-т**

1. Двухатомные молекулы. Метод молекулярных диаграмм. Его использование в химии высоких энергий.

2. Флуоресценция: связь квантовых выходов флуоресценции с химическим строением молекул. Фосфоресценция. О роли триплетных состояний.

3. Современные методы расчета органических молекул с учетом статической и динамической корреляции электронов в молекулах.

4. Применение методов с учетом взаимодействия конфигураций. Методы CIS.

5. Туннельный эффект в фотохимических процессах.

Квазиклассическое приближение в квантовой химии.

6. Применение квантовой химии в фотохимии и спектроскопии.

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

8. Комплексы с переносом заряда и их роль в фотохимии. Особенности их описания при помощи методов квантовой химии.

### 5.3.3 Типовые задания (оценочное средство - Контрольные вопросы) для оценки сформированности компетенции ПК-2-н

1. Классификация молекулярных орбиталей на основе молекулярных квантовых чисел. Связывающие, несвязывающие и разрыхляющие молекулярные орбитали.
2. Классификация Каша. Основные свойства возбужденных состояний ( $\pi \rightarrow \pi^*$ ), ( $n \rightarrow \pi^*$ ), ( $\pi \rightarrow \pi^*$ ) и ( $n \rightarrow \pi^*$ )-типа. Различие в их фотофизических и фотохимических свойствах. Методологическое значение этой классификации.
3. Приближение МО ЛКАО. Уравнения Хартри-Фока-Руутаана. Методологическое значение этого приближения.
4. Правила сохранения элементов симметрии в фотохимических реакциях. Правила корреляции.
5. Оценка величин интегралов дипольных моментов перехода с использованием методов теории групп.
6. Внутренняя конверсия. Интеркомбинационная конверсия. Факторы, влияющие на интеркомбинационную конверсию. Колебательная релаксация.
7. Применение метода DFT для расчета возбужденных состояний.
8. Особенности расчета возбужденных состояний органических молекул при помощи методов современной квантовой химии.
9. Понятие о молекулярных термах.
10. Туннельный эффект. Теория туннельного переноса электрона, протона и атома водорода. Значение ее для современной фотохимии. Подбарьерные кинетические процессы. Работы акад. Гольданского.
11. Применение квантовой химии для изучения механизмов фотохимических реакций.
12. Описание возбужденных молекул при помощи квантовой химии.
13. Электронные спектры поглощения. Флуоресценция, фосфоресценция, перенос энергии электронного возбуждения как методы исследования в химии высоких энергий.
14. Расчет интегралов дипольного момента перехода между различными электронными состояниями органических молекул – основа для создания правил отбора в фотофизических и фотохимических процессах.
15. Квантовая химия как методологическая основа плазмохимических реакций

### 5.3.4 Типовые задания (оценочное средство - Контрольные вопросы) для оценки сформированности компетенции ПК-3-н

1. Поверхности потенциальной энергии – преимущества и недостатки теоретических моделей, использующих эту концепцию.
2. Молекулярные термы. Описание возбужденных состояний двухатомных молекул

3. Диаграмма Яблонского. Основные фотофизические процессы с участием возбужденных состояний.
4. Перенос энергии между молекулами в возбужденном и основном состояниях.
5. Теория коэффициентов А и В Эйнштейна для описания динамики возбужденных состояний.
6. Понятие об электронной и спиновой плотности на атомах молекулы, порядках связей, индексах свободной энергии, потенциалах ионизации молекулярных систем.
7. Метод поверхностей потенциальной энергии. Применение его для описания процессов в химии высоких энергий.
8. Метод фронтальных молекулярных орбиталей, как основа для изучения окислительно - восстановительных реакций органических соединений.

### Критерии оценивания (оценочное средство - Контрольные вопросы)

Оценка	Критерии оценивания
превосходно	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки. Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов. Продемонстрирован творческий подход к решению нестандартных задач.
отлично	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки, без ошибок. Продемонстрированы все основные умения, решены все основные задачи с отдельными несущественным недочетами, выполнены все задания в полном объеме. Продемонстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов.
очень хорошо	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несущественных ошибок. Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами. Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов.
хорошо	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых ошибок. Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, в полном объеме, но некоторые с недочетами. Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.
удовлетворительно	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок. Продемонстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме. Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторыми недочетами
неудовлетворительно	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки. При решении стандартных задач не продемонстрированы основные

Оценка	Критерии оценивания
	умения и базовые навыки.
плохо	Отсутствие знаний теоретического материала. Отсутствие минимальных умений. Отсутствие владения материалом. Невозможность оценить наличие знаний, умений и навыков вследствие отказа обучающегося от ответа.

## 6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

Основная литература:

1. Зеленцов Сергей Васильевич. Введение в фотохимию : учебное пособие / ННГУ. - Н. Новгород : Изд-во Нижегород. гос. ун-та, 2006. - 183 с. - В надзаг.: Национальный проект "Образование". Инновационная образовательная программа Нижегород. ун-та. - ISBN 5-85746-930-9 : 27-00., 2 экз.
2. Зеленцов С. В. Фотохимические реакции органических соединений : учеб. пособие / Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского. - Н. Новгород : Изд-во ННГУ, 2007. - 188 с. - 26.00., 2 экз.
3. Серова В. Н. Фотохимия : учебное пособие / В. Н. Серова. - Москва : Юрайт, 2023. - 157 с. - (Высшее образование). - ISBN 978-5-534-14022-4. - Текст : электронный // ЭБС "Юрайт"., <https://e-lib.unn.ru/MegaPro/UserEntry?Action=FindDocs&ids=847035&idb=0>.
4. Фотохимические процессы в слоях / под ред. А. В. Ельцова. - Л. : Химия, Ленингр. отд-ние, 1978. - 232 с. : с граф. - 2.80., 1 экз.

Дополнительная литература:

1. Введение в фотохимию органических соединений / под ред. Г. О. Беккера ; пер. с нем. Э. Р. Захса и В. С. Кузнецова ; под ред. А. В. Ельцова. - Л. : Химия, Ленингр. отд-ние, 1976. - 379 с. : ил. - 2.46., 2 экз.
2. Калверт Д. Фотохимия / пер. с англ. Р. Н. Нурмухаметова [и др.] ; под ред. Р. Ф. Васильева. - М. : Мир, 1968. - 671 с. : ил. - 4.27., 3 экз.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы (в соответствии с содержанием дисциплины):

Gaussian03, ORCA 5.0

## 7. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных образовательной программой, оснащены мультимедийным оборудованием (проектор, экран), техническими средствами обучения.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечены доступом в электронную информационно-образовательную среду.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ННГУ по специальности 04.05.01 -  
Фундаментальная и прикладная химия.

Автор(ы): Зеленцов Сергей Васильевич, доктор химических наук, доцент.

Заведующий кафедрой: Маркин Алексей Владимирович, доктор химических наук.

Программа одобрена на заседании методической комиссии от 28.09.2023 г., протокол № 1.