

Программа утверждена на заседании
Ученого Совета химического факультета
МГУ имени М.В.Ломоносова
Протокол № 4 от 03 июня 2015 г.

Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Наименование дисциплины (модуля): **Комбинация квантового и классического подходов к описанию реакционной способности и химических реакций молекул (Combined quantum-classical description of the reactivity and reactions of molecules)**

Курс читается на английском языке, предназначен для аспирантов химического факультета, специализирующихся в области физической химии, и может быть также полезен аспирантам, специализирующимся в области органической, неорганической или биологической химии, чья научная работа связана с изучением механизмов и закономерностей химических превращений.

Основная цель курса – познакомить слушателей с базовыми концепциями теоретической физики и химии, позволяющими неэмпирически оценивать реакционную способность молекул, вероятность их участия в различных реакциях, а также термодинамические и кинетические характеристики этих превращений.

2. Уровень высшего образования– подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре

3. Направление подготовки: 04.06.01 Химические науки. Направленность (профиль) Физическая химия, Математическая и квантовая химия

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок 1 «Дисциплины (модули)». Дисциплина на иностранном языке по выбору аспиранта в весеннем семестре первого или второго года обучения.

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

Формируемые компетенции (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
УК-2 способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	31 (УК-2) Знать методы научно-исследовательской деятельности и историческую эволюцию применяемых концепций
ОПК-1 способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	У1 (ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования
ПК-4 Способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.04 Физическая химия	315 (ПК-4) Знать теоретические основы оценки полных и дифференциальных сечений химических превращений
	316 (ПК-4) Знать приближенные модельные подходы к расчету уровневых, микроскопических и макроскопических констант скорости химических реакций и условия их применимости
	У14 (ПК-4) Уметь формировать корректный набор возможных каналов химического превращения и оценивать вероятности реализации отдельных каналов
ПК-15 способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.17 Математическая и квантовая химия	31 (ПК-15) Знать квантовохимические методы моделирования динамики химических превращений, основанные на различных приближениях
	32 (ПК-15) Знать современные способы определения индексов реакционной способности молекул, основанные на результатах квантово-химических расчетов.
	У1 (ПК-15) Уметь выбирать корректные методы описания электронного строения интересующей молекулярной системы и ее динамической эволюции
	В1 (ПК-15) Владеть навыками оценки характерных времен

	различных излучательных, безызлучательных и реакционных процессов, которые реализуются при фотохимическом возбуждении молекулярных систем.
--	--

6. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетные единицы, всего 108 часов, из которых 52 часа составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (36 часов занятия лекционного типа, 8 часов мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации, 8 часов групповые и индивидуальные консультации), 56 часов составляет самостоятельная работа учащегося.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

В специалитете или магистратуре должны быть освоены общие курсы «Математический анализ», «Линейная алгебра», «Теория вероятностей», «Дифференциальные уравнения», «Уравнения математической физики», «Квантовая механика», «Квантовая химия», «Строение молекул», «Физическая химия».

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы из них		
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Текущий контроль успеваемости, промежуточная аттестация	Всего	Выполнение домашних заданий	Работа с оригинальной литературой, подготовка рефератов	Всего
Тема 1.		6		1			7		10	10
Тема 2.		8		1	1		10		12	12
Тема 3.		8		1	1		10		12	12
Тема 4		8		1	1		10		12	12
Тема 5		6		1			7		10	10
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>	8					8	8			
Итого	108	36		5	3	8	52	18	38	56

Содержание тем:

Тема 1. Основные подходы квантовой механики, позволяющие определять вероятности реализации различных каналов химических превращений и оценивать полное и дифференциальные сечения химической реакции.

Тема 2. Привлечение данных о классической динамике частиц в определенных физических условиях для оценки уровневой, микроскопической и макроскопической констант скорости химического превращения. Применимость допущения о равновесии изучаемой реакционной системы и ее описания в рамках канонического ансамбля Гиббса. Анализ стационарных и динамических условий применимости приближения адиабатичности при описании бинарных процессов, реализующихся при столкновении частиц. Определение трансмиссионного фактора и переход к классическому уравнению теории абсолютных скоростей реакций

Тема 3. Квантовохимические методы моделирования динамики химических превращений в адиабатическом и неадиабатическом приближениях. Возможность перехода при определенных условиях к классическим силовым полям, аппроксимирующим адиабатические потенциалы. Комбинированные квантово-классические подходы к описанию стационарных состояний и динамики превращений молекулярных систем большого размера.

Тема 4. Стационарные характеристики системы на различных стадиях химического превращения. Многоконфигурационное описание электронных состояний молекул при анализе больших областей конфигурационного пространства. Особенности распределения суммарной электронной плотности молекул реагентов и возможность применения теории граничных орбиталей при анализе реакционной способности молекул. Теоретическое определение химического потенциала и электроотрицательности частиц. Неэмпирическое введение понятий жесткости и мягкости; теория Пирсона жестких и мягких кислот и оснований в ее современном представлении. Электронные функции Фукуи и ориентационные эффекты в химических реакциях. Сжатые функции Фукуи и количественные оценки электрофильности и нуклеофильности частиц.

Тема 5. Влияние внешних полей на химические превращения. Характеристики молекул, определяющие их линейный и квадратичный отклик на внешнее электрическое и магнитное поля. Реакции, протекающие под воздействием излучения. Фотохимические превращения и сопровождающие их процессы колебательной релаксации, внутренней и интеркомбинационной конверсии, флуоресценции и фосфоресценции. Теоретические оценки характерных времен указанных процессов

8. Образовательные технологии

Лекции с презентациями и интерактивной демонстрацией решения задач на персональном компьютере.

9. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Оригинальные англоязычные статьи, посвященные разработке, обоснованию, критериям применимости и практическому использованию различных рассматриваемых в лекционном курсе методов.

10. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Ю.В. Новаковская "Теория скорости химического превращения", часть I, Москва: химический факультет МГУ, 2003, 65 с; часть II, Москва: химический факультет МГУ, 2003, 82 с.
2. S. Glasstone, K.J. Laidler, H. Eyring, "The theory of rate processes", New York: McGraw Hill, 1941.
3. .L. Piela, "Ideas of quantum chemistry", New York: Elsevier, 2007.
4. L. Pauling, E.B Wilson, "Introduction to quantum mechanics (with applications to chemistry)", New York: Dover, 1986.

Дополнительная литература

1. W.H. Flygare, "Molecular structure and dynamics", New Jersey: Prentice Hall. 1978.
 2. E.A. Moelwyn-Hughes, "The chemical states and kinetics of solutions", New York: Academic, 1971.
 3. H. Eyring, S.H. Lin, S.M. Lin, "Basic chemical kinetics", New York: Wiley, 1980.
 4. F. Jensen, "Introduction to computational chemistry", Chichester: Wiley, 2001.
- Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости):
 1. NIST (National Institute of Standards) Chemistry WebBook, NIST Standard reference Database number 69, <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
 2. Computational chemistry comparison and benchmark database, release 18, standard reference database 101, <http://cccbdb.nist.gov/>
 3. Chemcraft graphical program, <https://www.chemcraftprog.com>

11. Язык преподавания – английский

12. Преподаватели:

доктор физико-математических наук, профессор Новаковская Юлия Вадимовна, [e-mail](#), 8-495-939-48-62

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

1. Планируемые результаты обучения для формирования компетенций п.5 и соответствующие им критерии оценивания приведены в Приложении 1.
2. Вопросы к зачету
 - Reactions viewed as time evolution of a quantum system. Binary collisions. Propagator. Scattering operator and S matrix. Diverse channels of binary transformations and their probabilities. Examples.
 - Reaction rate constant under equilibrium conditions: Validity of equilibrium approximation and the limits of applicability. Eyring kinetic equation. Examples of application.
 - Adiabatic vs. nonadiabatic description of a system. Dynamic aspect of the problem: Massey parameter and criterion and their generalizations for a multidimensional case.
 - Nonempirical molecular dynamics at a partial consistency between the evolution of electronic and nuclear subsystems: Car-Parinello molecular dynamics. Approximations and applicability of the method. Examples.
 - Combined quantum/classical description of macromolecules. Separation of quantum and classical subsystems: link atom and connection atom approaches. Quantum subsystem in a classical basin: mechanical and electronic embedding.
 - Intersystem crossing and phosphorescence characteristic times. Supplementary fluorescence and phosphorescence ranges. Examples: organic light-emitting diodes.
 - Reactants analyzed in terms of the electron density distribution. Density-functional based interpretation: electronegativity and chemical potential. Comparison to classical concepts. Examples.
3. Примеры практических контрольных заданий (ПКЗ)
 - Reactants and chemical transformations analyzed in terms of the electron density distribution. Chemical hardness and global softness. Illustration of the maximum hardness principle and Pearson's hard and soft acids and bases principle.
 - Reactions viewed as the electron density redistribution. Estimation of the electronic Fukui functions and local softness. Prediction of relative electro- and nucleophilicity of molecules
 - Estimation of probabilities of induced transitions based on the quantum theory of molecules in electromagnetic fields and Einstein's phenomenological model. Radiative lifetimes of a molecule in different excited states and non-radiative relaxation.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Зачет проводится по билетам, каждый из которых включает теоретический вопрос, ответ на который требует анализа лекционного материала и оригинальных статей. Уровень знаний аспиранта оценивается на «зачтено», «незачтено». Оценка «зачтено»

выставляется, если по шкале оценивания учащийся демонстрирует знания умения и владения, соответствующие категориям 3, 4 и 5. В ходе зачета, проводимого в форме представления подготовленных мультимедийных презентаций, сопровождаемого вопросами преподавателя и остальных слушателей курса по представленному материалу, оценивается степень сформированности «знаниевой» компоненты компетенций УК-2, ПК-4 и ПК-13. Частично сформированность умения выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования (ОПК-1, ПК-4, ПК-15) проверяется при выполнении ПКЗ, их оценка учитывается как одна из составляющих при выставлении зачета.

Приложение 1.

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине «Комбинация квантового и классического подходов к описанию реакционной способности и химических реакций молекул» на основе карт компетенций выпускников

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю) и ШКАЛА оценивания					ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ*
	1	2	3	4	5	
31 (УК-2) Знать методы научно-исследовательской деятельности и историческую эволюцию применяемых концепций	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о теоретических концепциях анализа кинетических параметров различных каналов химических превращений	Несистематические знания о теоретических концепциях анализа кинетических параметров различных каналов химических превращений	Сформированное, но содержащее отдельные пробелы представление о теоретических концепциях анализа кинетических параметров различных каналов химических превращений	Сформированное и систематическое представление о теоретических концепциях анализа кинетических параметров различных каналов химических превращений	Устный опрос в ходе зачета
У1 (ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования	Отсутствие умений	Умение выбирать и использовать некоторые расчетные методы квантовой химии для оценки различных критериев реакционной способности	Шаблонное умение выбирать и использовать расчетные методы квантовой химии разного уровня для оценки различных критериев реакционной способности	В целом достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы умение выбирать и использовать расчетные методы квантовой химии для оценки различных критериев реакционной способности	Сформированное умение обоснованно выбирать и грамотно использовать расчетные методы квантовой химии для оценки различных критериев реакционной способности	Выполнение практического контрольного задания в ходе зачета
315 (ПК-4) Знать теоретические ос-	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о	Ограниченные представления о	Сформированные, но содержащие от-	Сформированные и систематиче-	Устный опрос в ходе зачета

новы оценки полных и дифференциальных сечений химических превращений		методах оценки сечений различных каналов химических превращений	методах оценки сечений различных каналов химических превращений	дельные пробелы знания о методах оценки сечений различных каналов химических превращений	ские знания о методах оценки сечений различных каналов химических превращений	
316 (ПК-4) Знать приближенные модельные подходы к расчету уровневых, микроскопических и макроскопических констант скорости химических реакций и условия их применимости	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о методах расчета констант скорости различного уровня и их применимости в различных условиях	Ограниченные представления о методах расчета констант скорости различного уровня и их применимости в различных условиях	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания о методах расчета констант скорости различного уровня и их применимости в различных условиях	Сформированные и систематические знания о методах расчета констант скорости различного уровня и их применимости в различных условиях	Устный опрос в ходе зачета
У14 (ПК-4) Уметь формировать корректный набор возможных каналов химического превращения и оценивать вероятности реализации отдельных каналов	Отсутствие умений	Умение приближенно оценивать вероятности реализации некоторых каналов химических превращений	Шаблонное умение оценивать вероятности реализации некоторых каналов химических превращений	В целом достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы умение оценивать вероятности реализации различных каналов химических превращений	Сформированное умение обоснованно выбирать возможные каналы химического превращения и грамотно оценивать вероятности их реализации	Выполнение практического контрольного задания в ходе зачета
31 (ПК-15) Знать квантовохимические методы моделирования динамики химических превращений, основанные на различных приближениях	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о существующих стационарных и динамических методах квантовой химии	Ограниченные представления о существующих стационарных и динамических методах квантовой химии	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания о существующих стационарных и динамических методах квантовой химии	Сформированные и систематические знания о существующих стационарных и динамических методах квантовой химии	Устный опрос в ходе зачета
32 (ПК-15) Знать современные спо-	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления об	Ограниченные представления о	Сформированные, но содержащие от-	Сформированные и систематиче-	Устный опрос в ходе зачета

собы определения индексов реакционной способности молекул, основанные на результатах квантово-химических расчетов.		индексах реакционной способности, определяемых на основании квантовохимического моделирования	об индексах реакционной способности, определяемых на основании квантовохимического моделирования	дельные пробелы знания о об индексах реакционной способности, определяемых на основании квантовохимического моделирования	ские знания о об индексах реакционной способности, определяемых на основании квантовохимического моделирования	
У1 (ПК-15) Уметь выбирать корректные методы описания электронного строения интересующей молекулярной системы и ее динамической эволюции	Отсутствие умений	Умение относительно корректно выбирать методы описания электронного строения молекул и их динамической эволюции	Шаблонное умение выбирать методы описания электронного строения молекул и их динамической эволюции	В целом достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы умение выбирать методы описания электронного строения молекул и их динамической эволюции	Сформированное умение обоснованно выбирать и грамотно применять методы описания электронного строения молекул и их динамической эволюции	Выполнение практического контрольного задания в ходе зачета
В1 (ПК-15) Владеть навыками оценки характерных времен различных излучательных, безызлучательных и реакционных процессов, которые реализуются при фотохимическом возбуждении молекулярных систем.		Частичное владение навыками оценки характерных времен некоторых процессов, реализующихся при фотохимическом возбуждении молекулярных систем.	Шаблонное владение навыками оценки характерных времен некоторых процессов, реализующихся при фотохимическом возбуждении молекулярных систем.	В целом достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы владение навыками оценки характерных времен различных процессов, реализующихся при фотохимическом возбуждении молекулярных систем.	Сформированное владение навыками грамотной оценки характерных времен различных процессов, реализующихся при фотохимическом возбуждении молекулярных систем.	Выполнение практического контрольного задания в ходе зачета