

Программа утверждена на заседании
Ученого Совета химического факультета
МГУ имени М.В.Ломоносова
Протокол № 4 от 29 мая 2014 г.

Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Наименование дисциплины (модуля): **Моделирование электронной структуры супрамолекулярных систем**

Цель: обучение основам использования современных методов моделирования электронной структуры молекул для прогнозирования физико-химических свойств веществ.

Задачи: обучение направлено на приобретение учащимися:

- (1) знания теоретических основ, общих возможностей и ограничений важнейших методов моделирования электронной структуры молекул и супрамолекулярных образований «из первых принципов», необходимых для описания физико-химических свойств и процессов,
- (2) способов дальнейшего использования результатов моделирования,
- (3) умения выбрать технологию и средства моделирования для прогнозирования тех или иных свойств веществ или процессов в простейших ситуациях,
- (4) представлений о функционировании типичного программного комплекса, предназначенного для моделирования электронной структуры, и умения решать с помощью одного из таких комплексов несложные практические задачи,
- (5) оценивать адекватность средств моделирования и соответственно надежность результатов при анализе публикаций.

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

3. Направление подготовки: 04.06.01 Химические науки, **направленность:** Физическая химия

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок 1 «Дисциплины (модули)».

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	З1 (УК-2) Знать методы научно-исследовательской деятельности
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	З1 (ПК-4) Знать современное состояние науки в области физической химии З14 (ПК-4) Знать: теоретические основы, возможности и ограничения наиболее популярных и/или перспективных моделей электронной структуры вещества из первых принципов У13 (ПК-4) Уметь выбрать технологию моделирования электронной структуры, адекватную поставленной физико-химической проблеме, и средства выполнения расчетов в рамках этой технологии; интерпретировать результаты расчетов У14 (ПК-4) Уметь оценивать надежность и уровень точности приводимых в литературе данных, полученных с использованием моделирования электронной структуры В6 (ПК-4) Владеть основными технологиями численного моделирования электронной структуры супрамолекулярных систем «из первых принципов» В7 (ПК-4) Владеть навыками решения квантово-механических задач с использованием доступного программного обеспечения

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

Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетных единицы, всего 108 часов, из которых 46 часов составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (18 часов занятия лекционного типа, 18 часов семинарские занятия, 10 часов групповые консультации), 62 часа составляет самостоятельная работа аспиранта.

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

Знать:

1. основы квантовой механики, в первую очередь квантовой механики простых систем в стационарных связанных состояниях».
2. основные методы линейной алгебры, умение оперировать с матричными представлениями операторов
3. начала квантовой химии

Иметь: элементарные навыки работы с любой версией ОС unix

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	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и	Всего
Тема 1. Электронные состояния	8	1		1			2	6		6
Тема 2. Модель независимых частиц	9	2		1			3	6		6
Тема 3. Алгебраическое приближение, базисные системы	11	2	2	1			5	6		6
Тема 4. Электронная корреляция в «теориях волновых функций»	11	2	2	1			5	6		6

Тема 5. Матрицы плотности и функции плотности	11	2	2	1			5	6		6
Тема 6. Методы теории функционала плотности	8	1		1			2	6		6
Тема 7. Моделирование межмолекулярных взаимодействий	13	2	4	1			7	6		6
Тема 8. Валентное приближение	11	2	2	1			5	6		6
Тема 9. Учет взаимодействия с внешней средой	15	2	4	1			7	8		8
Тема 10. Принципы расчета возбужденных электронных состояний	11	2	2	1			5	6		6
Промежуточная аттестация: <u>зачет</u>										
Итого	108	18	18	10			46	62		62

8. Образовательные технологии:

Проводятся лекции с использованием мультимедийной техники; семинарские занятия – в компьютерном классе, оснащенном компьютерами под управлением ОС *ix для решения задач и комплексом программ вычислительной квантовой химии NWChem (<http://www.nwchem-sw.org>), средствами связи с компьютерами (клоны ssh)

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

Аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и задания для самостоятельной работы. По теме каждой лекции указывается материал в источниках из списков основной и дополнительной литературы, а также из интернет-ресурсов.

10. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. L. Piela. Ideas of quantum chemistry. Amsterdam etc., Elsevier, 2007.
2. В. И. Барановский. Квантовая механика и квантовая химия. М., издательский центр "Академия", 2008
3. И.В. Абаренков, В.Ф. Братцев, А.В. Тулуб. Начала квантовой химии. М., "Высшая школа", 1989

Дополнительная литература

1. А.И. Дементьев, С.О. Адамсон. Строение молекул и квантовая химия. М., МФТИ, 2008
2. Н.Ф. Степанов. Квантовая механика и квантовая химия. М., "Мир", 2001
3. K. Burke. The ABC of DFT. Irvine, CA, 2007. <http://dft.uci.edu/sites/default/files/g1.pdf>
4. А.В. Бандура, Р.А.Эварестов. Неэмпирические расчеты кристаллов в атомном базисе. Спб, изд-во С.-Петербур. ун-та, 2007

Периодические издания

Описание комплекса программ моделирования электронной структуры NWChem: http://www.nwchem-sw.org/index.php/Main_Page

Портал базисных систем и псевдопотенциалов EMSL: <https://bse.pnl.gov/bse/portal>

11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватели: Зайцевский Андрей Вениаминович д.ф.-м.н., гл.научн.сотр, andrei.zaitsevskii@gmail.com

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. Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета.
- Образцы заданий для промежуточного контроля усвоения материала (зачета):
 1. Определить равновесную конфигурацию димера воды $(\text{H}_2\text{O})_2$ и энергию димеризации в приближении Хартри-Фока и с учетом кулоновской корреляции по многочастичной теории возмущений второго порядка. Как соотносится энергия димеризации с типичным значением энергии водородной связи в воде? Как меняется оценка этой величины при переходе от dz к tz базису?
 2. Оценить энергию разрыва связи в молекуле азота с учетом кулоновской электронной корреляции разными способами (MP2, DFT с полулокальными и гибридными приближенными функционалами) и без таковой и сопоставить результаты с данными эксперимента. Построить зависимость оценок энергии от размера базиса (dz, tz, qz) и попытаться ее объяснить

3. Оценить энергию разрыва связи в молекуле фтора с учетом кулоновской электронной корреляции во втором-четвертом порядках многочастичной теории возмущений и сопоставить результаты с данными эксперимента. Построить зависимость оценок энергии от размера базиса (dz , tz , qz) и попытаться ее объяснить. Примечание: считать точность определения равновесного межъядерного расстояния по MP2 достаточной.
4. Построить зависимость минимальной потенциальной энергии молекулы дихлорэтана от диэдрального угла в приближении SCF и оценить барьер внутреннего вращения во втором порядке многочастичной теории возмущений
5. Оценить сродство к электрону атома фтора по теореме Купманса (двумя способами) и как разность полных энергий нейтрального иона – с учетом кулоновской корреляции (по теории возмущений Меллера—Плессета и с помощью теории функционала плотности) и без таковой. Исследовать сходимость оценки по мере расширения базиса от dz до qz Сопоставить с экспериментальным значением.
6. Определить равновесные геометрические параметры и оценить разность равновесных энергий цис- и транс-бутадиена. Как эффекты кулоновской корреляции электронов влияют на эту оценку (если судить по данным многочастичной теории возмущений второго порядка)?
7. Оценить потенциал ионизации атома неона по теореме Купманса (двумя способами) и как разность полных энергий нейтрального иона – с учетом кулоновской корреляции и без таковой. Исследовать сходимость оценки по мере расширения базиса от dz до qz Сопоставить с экспериментальным значением. Можно ли ограничиться вторым порядком теории возмущений?
8. Оценить барьер инверсии молекулы аммиака в приближении SCF и во втором порядке многочастичной теории возмущений. Как зависит результат от расширения базиса (от dz до qz)?
9. Как изменяется равновесная геометрия молекулы этилена при ионизации? На сколько различаются вертикальный и адиабатический потенциал ионизации? Насколько точен ответ, получаемый в приближении Хартри–Фока? 1
10. Определите барьер внутреннего вращения молекулы этана. Какой вклад в эту оценку дают эффекты кулоновской корреляции электронов (оценить на уровне MP2)?

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Зачет проходит по итогам балльно-рейтинговой системы оценивания, учитывающей результаты выполнения задач, представленных в ФОС. Зачет выставляется при наборе 60% от максимально возможной суммы баллов.

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине СОВРЕМЕННЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ О КОРРОЗИОННЫХ И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ ПРИ СОЗДАНИИ И ЭКСПЛУАТАЦИИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ И КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ 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	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о современных расчетных методах химической термодинамики методах	Несистематические знания о современных расчетных методах химической термодинамики методах	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания о современных расчетных методах химической термодинамики методах	Сформированные и систематические знания о	Устный опрос в ходе зачета
У1(ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования	Отсутствие умений	Умение использовать только отдельные методы	Ограниченное умение выбирать и использовать современные расчетные методы химической термодинамики	В целом достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы умение выбирать и применять современные расчетные методы химической термодинамики	Сформированное умение применять при решении практических задач современные расчетные методы химической термодинамики	Текущий контроль, экспресс-опрос на лекции
31 (ПК-4) Знать современное состояние науки в области физической химии	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания о современных методах моделирования электронной структуры супрамолекулярных систем	Ограниченные представления о современных методах моделирования электронной структуры супрамолекулярных систем	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания о современных методах моделирования электронной структуры супрамолекулярных систем	Сформированные и систематические знания о современных методах моделирования электронной структуры супрамолекулярных систем	Устный опрос в ходе зачета

	1	2	3	4	5	
<i>314 (ПК-4) Знать:</i> теоретические основы, возможности и ограничения наиболее популярных и/или перспективных моделей электронной структуры вещества из первых принципов	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о теоретических основах наиболее популярных моделей электронной структуры вещества из первых принципов	Ограниченные представления о теоретических основах, возможностях и ограничениях наиболее популярных и/или перспективных моделей электронной структуры вещества из первых принципов	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания о теоретических основах, возможностях и ограничениях наиболее популярных и/или перспективных моделей электронной структуры вещества из первых принципов	Сформированные и систематические знания о теоретических основах, возможностях и ограничениях наиболее популярных и/или перспективных моделей электронной структуры вещества из первых принципов	Устный опрос в ходе зачета
<i>У13 (ПК-4) Уметь</i> выбрать технологию моделирования электронной структуры, адекватную поставленной физико-химической проблеме, и средства выполнения расчетов в рамках этой технологии; интерпретировать результаты расчетов	Отсутствие умений	Умеет выбрать технологию моделирования электронной структуры, но не может реализовать ее на практике	Умеет выбрать технологию моделирования электронной структуры, адекватную поставленной физико-химической проблеме, и средства выполнения расчетов в рамках этой технологии, но затрудняется корректно интерпретировать результаты расчетов	Умеет выбрать технологию моделирования электронной структуры, адекватную поставленной физико-химической проблеме, и средства выполнения расчетов в рамках этой технологии, допускает отдельные ошибки при интерпретации результатов расчета	Умеет выбрать технологию моделирования электронной структуры, адекватную поставленной физико-химической проблеме, и средства выполнения расчетов в рамках этой технологии; корректно интерпретировать результаты расчетов	Текущий контроль, экспресс-опрос на лекции, Домашние задания
<i>У14 (ПК-4) Уметь</i> оценивать надежность и уровень точности приводимых в литературе данных, полученных с использованием моделирования электронной структуры	Отсутствие умений	Затрудняется в оценке надежности и уровня точности приводимых в литературе данных, полученных с использованием моделирования электронной структуры	Допускает ошибки при оценке надежности и уровня точности приводимых в литературе данных, полученных с использованием моделирования электронной структуры	Допускает отдельные не принципиальные ошибки при оценке надежности и уровня точности приводимых в литературе данных, полученных с использованием моделирования электронной структуры	Умеет оценивать надежность и уровень точности приводимых в литературе данных, полученных с использованием моделирования электронной структуры	Текущий контроль, экспресс-опрос на лекции, Домашние задания

<p><i>В6 (ПК-4) Владеть основными технологиями численного моделирования электронной структуры супрамолекулярных систем «из первых принципов»</i></p>	<p>Отсутствие навыков</p>	<p>Допускает множественные ошибки при практическом использовании основных технологий численного моделирования электронной структуры супрамолекулярных систем «из первых принципов»</p>	<p>Допускает ошибки при практическом использовании основных технологий численного моделирования электронной структуры супрамолекулярных систем «из первых принципов»</p>	<p>Демонстрирует навыки владения основными технологиями численного моделирования электронной структуры супрамолекулярных систем «из первых принципов», с ограниченным количеством ошибок непринципиального характера</p>	<p>Демонстрирует сформированные навыки владения основными технологиями численного моделирования электронной структуры супрамолекулярных систем «из первых принципов»</p>	<p>Домашние задания</p>
<p><i>В7 (ПК-4) Владеть навыками решения квантово-механических задач с использованием доступного программного обеспечения</i></p>	<p>Отсутствие навыков</p>	<p>Допускает множественные ошибки принципиального характера при решении квантово-механических задач с использованием доступного программного обеспечения</p>	<p>Допускает ошибки при решении квантово-механических задач с использованием доступного программного обеспечения</p>	<p>Демонстрирует навыки решения квантово-механических задач с использованием доступного программного обеспечения с ограниченным количеством ошибок непринципиального характера</p>	<p>Демонстрирует сформированные навыки решения квантово-механических задач с использованием доступного программного обеспечения</p>	<p>Текущий контроль, экспресс-опрос на лекции, Домашние задания</p>