

Программа утверждена на заседании
Ученого Совета химического факультета
МГУ имени М. В. Ломоносова
Протокол № 4 от 3 июня 2015 г.

Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Наименование дисциплины (модуля): **Современные аспекты теоретической химии**

Курс посвящен рассмотрению и обсуждению современных методов и подходов теоретической химии. Детально обсуждается концепция поверхности потенциальной энергии и роль переходных состояний и конических пересечений в механизмах химических и фотохимических реакций. Дается обзор методов построения и анализа поверхностей потенциальной энергии различной размерности. Обсуждаются методы расчета молекулярных постоянных, активационных барьеров, координат химических реакций и их связь с термодинамическими функциями, константами равновесия и константами скоростей химических реакций. Рассмотрены теоретические основы современных экспериментальных методов исследования динамики молекулярных систем, включая импульсную спектроскопию с временным разрешением. Детально обсуждаются конформационные и спектральные свойства молекулярных систем в разных электронных состояниях. Материал курса будет полезен при подготовке к сдаче экзамена кандидатского минимума по специальностям 02.00.04 – физическая химия, а также 02.00.17 – математическая и квантовая химия.

2. Уровень высшего образования – аспирантура.

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 «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)
<p>УК-1. Способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях</p>	<p>31 (УК-1) Знать: методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях</p>
<p>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</p>	<p>31 (УК-2) Знать методы научно-исследовательской деятельности и историческую эволюцию применяемых концепций</p>
<p>ОПК-1 Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий</p>	<p>У1 (ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования</p>
<p>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 направлению (научной специальности) 02.00.04 и Физическая химия</p>	<p>314 (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</p>
<p>ПК-15 Способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установлен-</p>	<p>35 (ПК-15) Знать: теоретические основы, возможности и ограничения наиболее популярных и/или перспективных моделей электронной структуры вещества из первых принципов У6 (ПК-15) Уметь выбрать технологию моделирования электронной структуры,</p>

ным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направлению (научной специальности) 02.00.17 Математическая и квантовая химия	адекватную поставленной физико-химической проблеме, и средства выполнения расчетов в рамках этой технологии; интерпретировать результаты расчетов У7 (ПК-15) Уметь оценивать надежность и уровень точности приводимых в литературе данных, полученных с использованием моделирования электронной структуры
--	--

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 зачетных единицы, всего 108 часов, из которых 50 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (36 часов занятия лекционного типа, 8 часов групповые консультации, 6 часов мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации), 58 часов составляет самостоятельная работа аспиранта.

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

Для успешного освоения дисциплины и формирования компетенций слушателями в специалитете или бакалавриате и магистратуре должны быть освоены общие курсы: «Математический анализ», «Линейная алгебра», «Физика», «Теория вероятности и математическая статистика», «Физическая химия», «Классическая механика», «Квантовая механика», «Квантовая химия», «Строение молекул».

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 т.п.	Всего
Тема 1. Адиабатическое приближение как основное приближение квантовой химии	18	8		2			10	8		8
Тема 2. Моделирование колебательного движения молекулярных систем	18	8		2			10	8		8
Тема 3. Конформационный анализ молекул в основном и возбуждённых электронных состояниях.	26	8		2				6	10	16
Тема 4. Методы электронно-колебательной и фемтосекундной спектроскопии	30	12		2				6	10	16
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>	16					6				10
Итого	108	36	0	8	0	6	50	28	20	58

9. Образовательные технологии:

Проводятся традиционные лекции с использованием мультимедийных презентаций.

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

Аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и задания для самостоятельной работы, презентации к лекционным занятиям.

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

- 1) Д.В. Корольков. Теоретическая химия. Т. 1. Общие принципы и концепции. М.: Академкнига - 2007. - 463 с.
- 2) Степанов Н.Ф., Пупышев В.И. Квантовая механика молекул и квантовая химия. М.: Изд-во МГУ. 1991. 384с.
- 3) Вилков Л.В., Пентин Ю.А. Физические методы исследования в химии. Структурные методы и оптическая спектроскопия. М.: Высшая школа, 1987. 366 с.; Резонансные и электрооптические методы. М.: Высшая школа, 1989, 288 с.
- 4) Эйринг Г., Лин С.Г., Лин С.М.. Основы химической кинетики. М.: Мир, 1983.

Дополнительная литература

- 1). Банкер Ф., Йенсен П. Симметрия молекул и молекулярная спектроскопия. М.: Мир, Научный мир. 2004. 764 с.
- 2). Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. М.: Химия, 1986. 248 с.
- 4) Флайгер У. Строение и динамика молекул. (тт.1,2) М.: Мир. 1982. 868 с.
- 5) Батаев В.А., Венер М.В. Квантово-химическое описание реакционной способности молекулярных систем: учебное пособие. РХТУ им. Д.И. Менделеева Москва, 2012, 80 с.
- 6) Шевченко С.М. Молекула в пространстве. Вопросы современной химии "Химия," Ленинградское отд-ние, 1986 – 144 с
- 7) Domcke W., Yarkony D. R., and Köppel, H. (eds.) Conical Intersections: Theory, Computation and Experiment, vol. 17 of Advanced Series in Physical Chemistry (World Scientific, Singapore, 2011).
- 8) Malhado J.P., Bearpark M.J., Hynes J.T. Non-adiabatic dynamics close to conical intersections and the surface hopping perspective, *Frontiers in Chemistry*, 2014, Vol. 2, article 97.
- 9) Zewail A.H.. Femtochemistry: Atomic-Scale Dynamics of the Chemical Bond, *J. Phys. Chem. A* 2000, Vol. 104, p. 5660-5694
- 10) Gallmann L., Cirelli C., Keller U. Attosecond Science: Recent Highlights and Future Trends. *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 2012, Vol. 63, p. 447-469.
- 11) Toker Y., Svendsen A., Bochenkova A.V., Andersen L.H. On probing the barrier for internal rotation of the retinal chromophore. *Ang. Chem. Int. Ed.*, 2012, Vol. 51, p. 8757-8761.

12) Bochenkova A.V., Andersen L.H. Photo-initiated dynamics and spectroscopy of the deprotonated Green Fluorescent Protein chromophore, in Physical Chemistry in Action: Photophysics of Ionic Biochromophores (Eds: S. Brondsted Nielsen, J. A. Wyer), Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2013, pp. 67-103.

11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватели:

1. **Батаев Вадим Альбертович**, кандидат химических наук, вед. научн. сотр. кафедры физической химии химического факультета МГУ; e-mail: v.a.bataev@gmail.com
2. **Боченкова Анастасия Владимировна**, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физической химии химического факультета МГУ; e-mail: bochenkova@phys.chem.msu.ru

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 в форме защиты презентации):

1. Фемто- и аттосекундная спектроскопия. Основы и возможности методов.
2. Современные модели в химической кинетике.
3. Современные подходы в молекулярной динамике.
4. Конические пересечения и безызлучательные переходы.
5. Теоретические методы современного конформационного анализа.
6. Экспериментальные методы современного конформационного анализа.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Зачет проводится в форме доклада (презентации) с последующим обсуждением. Также аспирант может представить доклад на основе собственной работы. Но такой доклад должен иметь существенную методическую ценность, т.е. примеры из своей работы могут быть использованы только для иллюстрации или представления общих методов и подходов в теоретической химии.

Приложение 1.

**Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине «Математическая и квантовая химия»
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-1) Знать: методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания в области современных аспектов теоретической химии	Общие, но не структурированные знания в области современных аспектов теоретической химии	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания в области современных аспектов теоретической химии	Сформированные систематические знания в области современных аспектов теоретической химии	Текущий контроль, экспресс-опрос на лекции, реферат
31 (УК-2) Знать методы научно-исследовательской деятельности и историческую эволюцию применяемых концепций	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания в области современных аспектов теоретической химии	Общие, но не структурированные знания в области современных аспектов теоретической химии	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания в области современных аспектов теоретической химии	Сформированные систематические знания в области современных аспектов теоретической химии	Текущий контроль, экспресс-опрос на лекции, реферат
У1 (ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования	Отсутствие умений	Частично освоенное умение в выборе и применении экспериментальных и расчетно-теоретических методов исследо-	В целом успешное, но не систематическое умение в выборе и применении экспериментальных и расчетно-теоретических методов исследо-	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение в выборе и применении экспериментальных и расчетно-теоретических ме-	Успешное и систематическое умение в выборе и применении экспериментальных и расчетно-теоретических методов исследования конформационно	Текущий контроль

		вания конформационно нежестких молекулярных систем	ния конформационно нежестких молекулярных систем	тодов исследования конформационно нежестких молекулярных систем	нежестких молекулярных систем	
314 (ПК-4) Знать: теоретические основы, возможности и ограничения наиболее популярных и/или перспективных моделей электронной структуры вещества из первых принципов	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания в области современных методов квантовой химии	Общие, но не структурированные знания в области современных методов квантовой химии	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания в области современных методов квантовой химии	Сформированные систематические знания в области современных методов квантовой химии	Текущий контроль, экспресс-опрос на лекции
3 (ПК-4) Уметь выбрать технологию моделирования электронной структуры, адекватную поставленной физико-химической проблеме, и средства выполнения расчетов в рамках этой технологии; интерпретировать результаты расчетов	Отсутствие умений	Частично освоенное умение в выборе методов моделирования строения ППЭ молекулярных систем	В целом успешное, но не систематическое умение в выборе моделирования строения ППЭ молекулярных систем	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение в выборе моделирования строения ППЭ молекулярных систем	Успешное и систематическое умение в выборе моделирования строения ППЭ молекулярных систем	Текущий контроль, экспресс-опрос на лекции
У14 (ПК-4) Уметь оценивать надежность и уровень точности приводимых в литературе данных, полученных с использованием моде-	Отсутствие умений	Частично освоенное умение в оценке точности и адекватности метода моделирования электронного строе-	В целом успешное, но не систематическое умение в оценке точности и адекватности метода моделирования электронного	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение в оценке точности и адекватности метода моделирования	Успешное и систематическое умение в оценке точности и адекватности метода моделирования электронного строения и динами-	Текущий контроль, экспресс-опрос на лекции

лирования электронной структуры		ния и динамики молекулярных систем	строения и динамики молекулярных систем	электронного строения и динамики молекулярных систем	ки молекулярных систем	
35 (ПК-15) Знать: теоретические основы, возможности и ограничения наиболее популярных и/или перспективных моделей электронной структуры вещества из первых принципов	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания в области современных методов квантовой химии	Общие, но не структурированные знания в области современных методов квантовой химии	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания в области современных методов квантовой химии	Сформированные систематические знания в области современных методов квантовой химии	Текущий контроль, экспресс-опрос на лекции
У6 (ПК-15) Уметь выбрать технологию моделирования электронной структуры, адекватную поставленной физико-химической проблеме, и средства выполнения расчетов в рамках этой технологии; интерпретировать результаты расчетов	Отсутствие умений	Частично освоенное умение в выборе методов моделирования ППЭ молекулярных систем	В целом успешное, но не систематическое умение в выборе моделирования строения ППЭ молекулярных систем	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение в выборе моделирования строения ППЭ молекулярных систем	Успешное и систематическое умение в выборе моделирования строения ППЭ молекулярных систем	Текущий контроль, экспресс-опрос на лекции
У7 (ПК-15) Уметь оценивать надежность и уровень точности приводимых в литературе данных, полученных с использованием моделирования элек-	Отсутствие умений	Частично освоенное умение в оценке точности и адекватности метода моделирования электронного строения и динамики	В целом успешное, но не систематическое умение в оценке точности и адекватности метода моделирования электронного строения и дина-	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение в оценке точности и адекватности метода моделирования электронного	Успешное и систематическое умение в оценке точности и адекватности метода моделирования электронного строения и динамики молекулярных	Текущий контроль, экспресс-опрос на лекции

тронной структуры		молекулярных систем	мики молекулярных систем	строения и динамики молекулярных систем	систем	
-------------------	--	---------------------	--------------------------	---	--------	--