

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): **Теоретические методы исследования неорганических веществ и материалов**

Краткая аннотация: «*Теоретические методы исследования неорганических веществ и материалов*» является вариативной дисциплиной для научно-квалификационных работ при подготовке научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки кадров высшей квалификации 04.06.01 Химические науки и посвящена изложению основ методов теоретического исследования химических соединений и процессов, преимущественно на базе квантовомеханических расчетов, которые находят все большее применение в современной неорганической химии и химии твердого тела. Основное внимание уделяется возможностям теоретического моделирования, физическим принципам и модельным приближениям, которые лежат в основе методов, используемых при исследовании вещества в газообразном и конденсированном (растворы, твердые кристаллические тела) состоянии. Дается представление о типах решаемых проблем и подходах к их решению в зависимости от вида исследуемых соединений. Также в рамках курса рассматриваются некоторые практические аспекты квантовохимического моделирования и делается обзор наиболее широко применяемых программных пакетов. Курс рассчитан на слушателей, обладающих уровнем подготовки специалистов Химического факультета МГУ со специализацией в области неорганической химии, или аспирантов начального этапа обучения, планирующих подготовку и защиту научно-квалификационных работ по специальности ВАК 02.00.01-неорганическая химия или 02.00.21-химия твердого тела.

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

3. Направление подготовки: 04.06.01 Химические науки. Направленности (профили) Неорганическая химия, Химия твердого тела

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)
<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><i>В1 (УК-1) Владеть</i> навыками критического анализа проблем и достижений современной науки, возникающих 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><i>З1 (УК-2) Знать</i> методы научно-исследовательской деятельности</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><i>У1 (ОПК-1) Уметь</i> выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования</p>
<p>ПК-1 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) 02.00.01 Неорганическая химия</p>	<p><i>З1 (ПК-1) Знать</i> современное состояние науки в области неорганической химии</p>
<p>ПК-16 способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по</p>	<p><i>З1 (ПК-16) Знать</i> современное состояние науки в области химии твердого тела</p>

направленности (научной специальности) 02.00.21 Химия твердого тела	
---	--

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 38 часа составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (26 часов занятия лекционного типа, 6 часов консультаций (индивидуальных и групповых), 6 часов мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации), 70 часов составляет самостоятельная работа учащегося.

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

В специалитете или магистратуре должны быть освоены курсы «Неорганическая химия», «Математический анализ», «Физика», «Уравнения математической физики», «Квантовая химия», «Элементы строения вещества».

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

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля),	Всего (часы)	В том числе	
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них	Самостоятельная работа обучающегося, часы из них

форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)		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. П.	Всего
<p>Раздел 1. Введение Содержание раздела: Задачи теоретического моделирования объектов в современной химии. Классификация объектов, классификация методов моделирования в зависимости от свойств объектов и уровня их описания.</p>	6	2	-	-	-	-	2	4	-	4
<p>Раздел 2. Квантовая химия: методы решения уравнения Шредингера. Содержание раздела: Стационарное уравнение Шредингера. Адиабатическое приближение и приближение Борна-Оппенгеймера, их применимость. Одноэлектронное приближение, спин-орбитали. Метод МО-ЛКАО. Метод Хартри-Фока. Самосогласованное поле.</p>	10	2	-	-	-	-	2	8	-	8

<i>Полуэмпирические методы. Особенности, классификация и области применения полуэмпирических методов.</i>										
Раздел 3. Методы учета электронной корреляции. Содержание раздела: Природа электронной корреляции. Статическая и динамическая корреляция. Конфигурационные взаимодействия. Теория возмущений. Метод взаимодействующего кластера.	10	2	-	-	-	-	2	8	-	8
Раздел 4. Функционал электронной плотности (DFT). Содержание раздела: Теорема Хоэнберга-Кона. Уравнения Кона-Шэма. Обменно-корреляционный функционал. Основные типы функционалов. Современные подходы к использованию DFT. Нестационарная теория функционала плотности.	20	4	-	-	-	-	4	16	-	16
Раздел 5. Базисные наборы в неэмпирических расчетах. Содержание раздела: Классификация базисных наборов, типы функций, используемых в базисных наборах. Минимальные и расширенные базисы. Типы дополни-	12	2	2	-	-	-	4	8	-	8

тельных функций. Эффективные ядерные потенциалы и базисы для них.										
<p>Раздел 6. Моделирование электронной структуры молекулярных объектов.</p> <p>Содержание раздела: Модель молекулы в идеальном газе. Поверхность потенциальной энергии (ППЭ). Алгоритмы поиска стационарных точек. Локальный и глобальный минимумы. Моделирование термодинамических и кинетических параметров молекулярных систем. Моделирование континуума. Молекулярные свойства как производные энергии.</p>	6	2	-	-	-	-	2	4	-	4
<p>Раздел 7. Моделирование электронной структуры периодических систем.</p> <p>Содержание раздела: Модели твердого тела. Способы моделирования периодических структур. Модель идеального кристалла и кластерная модель твердого тела. Методы расчета электронной структуры идеального кристалла. Расчеты физических свойств твердых тел.</p>	6	2	-	-	-	-	2	4	-	4

<p>Раздел 8. Подходы к анализу данных, полученных при моделировании.</p> <p>Содержание раздела: Анализ волновой функции. Реконструкционный анализ, граничные орбитали. Заряды на атомах, различные схемы разделения, их достоинства и недостатки. Анализ химической связи на основе распределения электронной плотности. Электронная плотность и ее «производные», разностная плотность. Функция электронной локализации (ELF). Параметр локализации и топология ELF. Индикатор электронной локализуемости (ELI).</p>	18	6	-	-	4	-	10	8	-	8
<p>Раздел 9. Примеры программных пакетов для разных типов расчетов.</p> <p>Содержание раздела: Программы для молекулярных и зонных расчетов. Принципы работы, типы используемых базисных функций, приближения, достоинства и недостатки, сравнительный анализ характеристик и возможностей.</p>	10	4	-	2	-	-	6	4	-	4
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>	10						4			6
Итого	108	26	2	2	4		38	64		70

9. Образовательные технологии

Курс имеет электронную версию для презентации. Лекции читаются с использованием современных мультимедийных возможностей и проекционного оборудования. В преподавании дисциплины используются результаты исследований, полученные сотрудниками МГУ.

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

Аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и перечень домашних заданий. По теме каждой лекции указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы, а также из интернет-ресурсов.

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. В.Г. Цирельсон. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. М.: Бинوم, 2010. / 2-е изд. М: Бином, 2012.
2. F. Jensen Introduction to Computational Chemistry, 2nd Edition, Chichester, John Wiley & Sons, 2007.
3. Н.Ф. Степанов. Квантовая механика и квантовая химия. М: Мир / Изд-во МГУ, 2001
4. В.И.Минкин, Б.Я.Симкин, Р.М.Миняев Теория строения молекул, 2-е изд. Ростов-на-Дону Феникс. 1997
5. Л. Цюликке Квантовая химия, т.1. Москва Мир 1976

Вспомогательная литература

1. Р.Бейдер Атомы в молекулах: квантовая теория. М.: Мир 2001
2. В.А.Губанов, Э.З.Курмаев, А.Л.Ивановский. Квантовая химия твердого тела. Москва Наука 1984
3. Р. Хоффман. Строение твердых тел и поверхностей - взгляд химика теоретика. Москва. Мир. 1990
4. C. Fiolhais, F. Nogueira, M. Marques A Primer in Density Functional Theory. Springer-Verlag New York, 2003.
5. R.G. Parr, W. Yang Density Functional Theory of Atoms and Molecules. Oxford University Press, Oxford, 1989.
6. R.A. Evarestov. Theoretical Modeling of Inorganic Nanostructures. Symmetry and ab-initio Calculations of Nanolayers, Nanotubes and Nanowires. Springer, 2015.
7. A.D. Becke, K. E. Edgecombe. A simple measure of electron localization in atomic and molecular systems. Melville AIP Publishing 1990 Journal of Chemical Physics 92 v/ 9 (p.5397)
8. A. Savin. The electron localization function (ELF) and its relatives:interpretations and difficulties. Amsterdam. Elsevier. 2005. Journal of Molecular Structure: THEOCHEM. v/ 727 (p.127)
9. M. Kohout. A Measure of Electron Localizability. Hoboken Wiley Periodicals, Inc. 2004 International Journal of Quantum Chemistry v. 97 (p.651)

10. A.I. Baranov, M. Kohout. Electron Localization and Delocalization Indices for Solids. Hoboken. Wiley Periodicals, Inc. 2011. Journal of Computational Chemistry v. 32 (p.2064)

Периодическая литература

- *Advances in Quantum Chemistry, Journal of Computational Chemistry, Theoretical Chemistry Accounts, Chemistry – A European Journal*

Интернет-ресурсы

- NIST Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database <http://cccbdb.nist.gov/>

☒☒Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости):

Программные пакеты ParaView 4.1 и VESTA 3.

☒☒Описание материально-технической базы:

Лекционные занятия проводятся в аудитории, оборудованной презентационной техникой.

11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватели:

Кузнецов Алексей Николаевич, д.х.н., ведущий научный сотрудник, чл.-корр. РАН alexei@inorg.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.

Примеры контрольных вопросов для самостоятельной работы и подготовки к зачету

Раздел 1

1. Какую информацию о химических веществах и соединениях можно получить из расчетов?
2. Как классифицируются теоретические методы в химии?
3. Какие объекты можно моделировать?
4. В чем основное различие молекулярной механики и квантовой химии?

Раздел 2

1. Применимость стационарного уравнения Шредингера для описания химических систем?
2. Какие члены входят в гамильтониан многоэлектронной системы?
3. Что такое «спин-орбитали», в чем их особенность?
4. Какие приближения (допущения) используются в методе Хартри-Фока?
5. Что такое «самосогласованные орбитали»?
6. Выстройте полуэмпирические методы в порядке усложнения гамильтониана.
7. В чем состоят достоинства и недостатки полуэмпирических методов в сравнении с методом Хартри-Фока?

Раздел 3

1. Что такое «электронная корреляция», откуда она возникает?
2. Обязателен ли учет электронной корреляции для расчетов химических объектов?
3. В чем суть метода конфигурационных взаимодействий?
4. Позволяют ли методы электронной корреляции полностью учесть энергию корреляции?
5. Сравните эффективность различных методов учета электронной корреляции.
6. Существуют ли ограничения по типу объектов, для которых можно применять методы учета электронной корреляции?

Раздел 4

1. В чем основное ограничение теоремы Хоэнберга-Кона?
2. Что такое функционал плотности?
3. Каково математическое выражение обменно-корреляционного функционала и как он конструируется?
4. Почему существует много форм обменно-корреляционных функционалов?
5. Позволяет ли теория функционала плотности полностью учесть электронную корреляцию?
6. Почему приближение невзаимодействующего электронного газа (газа Ферми) применяется только локально в рамках методов, основанных на теории функционала плотности?
7. Перечислите основные недостатки DFT по сравнению с методами, вводящими поправки для учета электронной корреляции.
8. В чем преимущества и недостатки использования TDDFT по сравнению со стандартным применением методов DFT?

Раздел 5

1. Что такое «базис» и зачем он нужен при выполнении расчетов?
2. Какие классификационные признаки базисов можно выделить?
3. Как выбрать наилучший базис для решения конкретной задачи?

4. Что такое суперпозиция базисных функций?
5. Можно ли использовать эффективные ядерные потенциалы для расчетов химических объектов на основе легких элементов?
6. Почему диффузные и поляризационные функции считаются дополнением к базису?
7. Каковы особенности базисов для моделирования периодических систем?

Раздел 6

1. В каких условиях возможно квантовохимическое моделирование молекул и ионов?
2. Перечислите типы стационарных точек поверхности потенциальной энергии. Каково их математическое выражение?
3. Чем определяется форма поверхности потенциальной энергии?
4. В чем отличие между равновесной и стационарной геометрией?
5. Какие свойства молекул являются производными энергии? Дайте их математические выражения.
6. Можно ли с помощью континуальных моделей описывать процессы в газовой фазе, расплаве?

Раздел 7

1. В чем принципиальное отличие молекулярных расчетов от расчетов твердых тел?
2. Можно ли использовать одинаковые базисные наборы для расчетов молекулярных и периодических объектов?
3. Можно ли рассчитывать зонную структуру идеального кристалла в рамках кластерной модели?
4. Какие существуют способы квантовохимического моделирования дефектной структуры твердого тела?
5. Перечислите достоинства и недостатки использования базисов плоских волн для расчетов зонной структуры кристаллов.
6. Учитывается ли электронная корреляция при расчетах зонной структуры кристаллов?
7. Какие магнитные характеристики периодических кристаллов могут быть смоделированы теоретически?
8. В чем состоит проблема моделирования систем с частично заполненными d-оболочками? Каковы пути ее решения?

Раздел 8

1. Почему непосредственно волновую функцию не используют для описания химической связи?
2. Перечислите способы анализа волновой функции в орбитальном пространстве?
3. В чем достоинства и недостатки анализа электронной плотности в прямом пространстве?
4. В чем состоят главные особенности определения атома в рамках теории Бэйдера?
5. Перечислите основные схемы вычисления зарядов атомов. Каковы принципиальные недостатки вычисления зарядов в орбитальном пространстве, можно ли свести их к минимуму?
6. Можно ли использовать рассчитанную электронную плотность для анализа химических связей?
7. Дайте математическое выражение функции электронной локализации? Каков ее физический смысл?
8. Можно ли использовать ELF для определения количественных характеристик химической связи?

9. Для каких систем будут наблюдаться заметные различия в топологии ELF и ELI?

10. Каким образом строятся бассейны ELI?

Раздел 9

1. Можно ли использовать программы, предназначенные для зонных расчетов, для описания электронной структуры молекул?

2. Какие данные используются для ввода в программу при выполнении молекулярных/зонных расчетов?

3. Что является более важным для корректного выполнения расчета зонной структуры – точные координаты атомов или объем ячейки?

1. 4. Есть ли различия в подходе к вычислению электронной плотности и ELF между многоцелевыми пакетами программ (GAUSSIAN, WIEN2k и т.п.) и специализированным пакетом DGrid?

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Зачет проводится по билетам; билет включает 3 вопроса. В случае, если на все вопросы были даны удовлетворительные ответы, аспирант получает зачет. Ведомость приема зачета подписывается членами комиссии.

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине «Теоретические методы исследования неорганических веществ и 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	
<i>B1 (УК-1) Владеть</i> навыками критического анализа проблем и достижений современной науки, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	Отсутствие владения	Фрагментарное владение навыками критического анализа проблем и достижений современной науки, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	Неполное владение навыками критического анализа проблем и достижений современной науки, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы владения навыками критического анализа проблем и достижений современной науки, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	Сформированные систематические владения навыками критического анализа проблем и достижений современной науки, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.	Зачет в форме письменной работы с последующим собеседованием
<i>З1 (УК-2) Знать</i> методы научно-исследовательской деятельности	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания методов научно-исследовательской деятельности	Неполные знания методов научно-исследовательской деятельности	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания методов научно-исследовательской деятельности	Сформированные систематические знания методов научно-исследовательской деятельности	Зачет в форме письменной работы с последующим собеседованием

1	2	3	4	5	6	7
<i>У1 (ОПК-1) Уметь</i> выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования	Отсутствие умений	Частично освоенное умение выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования	В целом успешное, но не систематически осуществляемое умение выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования	Сформированное умение выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования	письменное решение задач
<i>З1 (ПК-1) Знать</i> современное состояние науки в области неорганической химии	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания современного состояния науки в области неорганической химии	Неполные знания современного состояния науки в области неорганической химии	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания современного состояния науки в области неорганической химии	Сформированные и систематические знания современного состояния науки в области неорганической химии	Зачет в форме письменной работы с последующим собеседованием
<i>З1 (ПК-16) Знать</i> современное состояние науки в области химии твердого тела	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания современного состояния науки в области химии твердого тела	Неполные знания современного состояния науки в области химии твердого тела	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания современного состояния науки в области химии твердого тела	Сформированные и систематические знания современного состояния науки в области химии твердого тела	Зачет в форме письменной работы с последующим собеседованием