

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
Акад. РАН, профессор



/В.В. Лунин/

«27» февраля 2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

**Избранные главы физической химии: квантовохимическое и молекулярное
моделирование**

Уровень высшего образования:

Специалитет

Направление подготовки (специальность):

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:

Физическая химия

Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №1 от 27.01.2017)

Москва 2017

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 22 июля 2011 года № 729 (в редакции приказов МГУ от 22 ноября 2011 года № 1066, от 21 декабря 2011 года № 1228, от 30 декабря 2011 года № 1289, от 27 апреля 2012 года № 303, от 30 декабря 2016 года № 1671).

Год (годы) приема на обучение

2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019

1. Наименование дисциплины (модуля): **Избранные главы физической химии: квантовохимическое и молекулярное моделирование**
2. Уровень высшего образования – **специалитет.**
3. Направление подготовки: **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.**
4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.
5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Компетенция	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
ОПК-1.С. Способность решать современные проблемы фундаментальной и прикладной химии, используя методологию научного подхода и систему фундаментальных химических понятий и законов	<p>Уметь анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы,</p> <p>Уметь: самостоятельно составлять план исследования</p> <p>Владеть навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения</p>
СПК-1.С. Способность использовать теоретические основы современных физико-химических методов исследования и анализа систем различной природы при решении практических задач	<p>Знать: теоретические основы современных методов исследования структуры и свойств веществ</p> <p>Уметь: формулировать задачи моделирования молекулярных систем</p> <p>Владеть: навыками обоснованного выбора средств решения задач современной физической химии</p>
СПК-4.С. Способность использовать физические и математические модели с учетом их возможностей и ограничений при обработке и интерпретации экспериментальных данных в избранной области физической химии	Знать: возможности и ограничения расчетных методов квантовой химии при решении практических задач

	Владеть: навыками использования программных средств и работы в компьютерных сетях, использования ресурсов интернета; основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации при решении физико-химических задач
СПК-5.С. Способность проводить квантовохимические, термодинамические и кинетические расчеты с использованием современных программных комплексов и баз данных	Уметь: использовать программные продукты для выполнения стандартных квантовохимических, термодинамических и кинетических расчетов Владеть: навыками использования профессиональных баз данных для получения информации, необходимой для физико-химического моделирования систем разной природы

6. Объем дисциплины 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 4 зачетных единицы, всего 144 часа, из которых 80 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (36 часов занятия лекционного типа, 36 часа – занятия семинарского типа, 4 часа – групповые консультации, 4 часа – промежуточный контроль успеваемости), 64 часа составляет самостоятельная работа студента.

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

Обучающийся должен

Знать: Основы линейной алгебры и математического анализа, квантовой механики в объеме курсов физико-математического цикла и цикла дисциплин, относящихся к строению молекул и квантовой химии в базовой части обучения.

Уметь: Находить взаимосвязи между микроскопическим строением молекул и макроскопическими физико-химическими свойствами вещества.

Владеть: Навыками использования базовых знаний дисциплин физико-математического цикла при решении проблем физической химии, в том числе с привлечением информационных баз данных.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Наименование	и краткое	Всего	В том числе
--------------	-----------	-------	-------------

содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	(часы)	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 к коллоквиумам	Всего
Тема 1. Особенности моделирования электронных состояний больших систем.	6	3	1				4			2
Тема 2. Модели независимых электронов (среднего поля). Средства достижения сходимости в методе самосогласованного поля.	10	3	5				8			2
Тема 3. Теория функционала плотности. Приближенные обменно-корреляционные функционалы. Особенности	10	4	4				8			2

методов решения уравнений Кона-Шема для больших систем.										
Тема 4. Многодетерминантные волновые функции. Размерная согласованность в теории возмущений Меллера-Плессета и методах связанных кластеров.	8	4	2				6			2
Тема 5. Проблема описания дисперсионных взаимодействия в теории функционала плотности.	6	2	2				4			2
Тема 6. Валентное приближение, остовные псевдопотенциалы. Релятивистские эффекты в молекулах и релятивистские псевдопотенциалы. Итоговый коллоквиум по темам 1-6.	14	2	4	2			8			6
Тема 7. Общие вопросы спектроскопии Прямая и обратная спектроскопическая задача.	6	4					4			2
Тема 8. Спектроскопия двухатомных молекул.	10	4	4				8			2
Тема 9. Потенциалы межатомного взаимодействия: их определение по экспериментальным и теоретическим данным.	8	2	4				6			2
Тема 10. Спектроскопия	8	4	2				6			2

многоатомных молекул: Классический и квантово-механический подходы к объяснению спектров.										
Раздел 11. Компьютерные методы в колебательной спектроскопии: Практические квантовохимические расчеты многоатомных молекул.	8	2	4				6			2
Тема 12. Теоретические модели, используемые при анализе колебаний многоатомных молекул: Итоговый коллоквиум по темам 7-12.	14	2	4	2			8			6
Промежуточная аттестация: <i>экзамен</i>	36					4	4			32
Итого	144	36	36	4		4	80			64

9. Образовательные технологии.

- использование мультимедийных презентаций и средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- использование квантовохимических программных комплексов и авторских программ для решения задач, нацеленных на усвоение лекционного материала.

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

По каждой теме указывается материал в источниках из списков основной и дополнительной 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. Учебное пособие. Издание 2-е (электронное). М.: Бинوم, 2012.
2. В. И. Барановский. Квантовая механика и квантовая химия. М., издательский центр “Академия”, 2008
3. М.А.Ельяшевич. Атомная и молекулярная спектроскопия. Москва. Эдиториал УРСС, 2001.
4. Ю.А.Пентин, Г.М.Курамшина. Основы молекулярной спектроскопии. Москва. Бинوم, Лаборатория знаний. 2008.

Дополнительная литература

1. П.А. Браун, А.А. Киселев. Введение в теорию молекулярных спектров. Л.: Изд-во.ЛГУ, 1983
2. И.В. Абаренков, В.Ф. Братцев, А.В. Тулуб. Начала квантовой химии. М., “Высшая школа”, 1989
3. И.В.Кочиков, Г.М.Курамшина, Ю.А.Пентин, А.Г.Ягола . Обратные задачи колебательной спектроскопии. Москва, Издательство КУРС, 2017.
4. P.F. Bernath. Spectra of atoms and molecules. Oxford, University Press, 2005.
5. L. Piela. Ideas of quantum chemistry. 2nd ed. Amsterdam etc., Elsevier, 2013 (1st ed., Amsterdam etc., Elsevier, 2007)

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

<http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMESS.html>

<http://gaussian.com/>

<http://cccbdb.nist.gov/> Computational Chemistry Comparison and Benchmark DataBase

<https://bse.pnl.gov/bse/portal>, портал гауссовых базисов для квантово-химических расчетов,

<https://www.molpro.net>, сайт программы для квантовохимических расчетов MOLPRO

12. Язык преподавания – русский

13. Преподаватели:

1. Гл.н.с., д.ф-м.н. Зайцевский Андрей Вениаминович., кафедра лазерной химии химического факультета МГУ, andrei.zaitsevskii@gmail.com, тел.: +7(495)939-28-25

2. В.н.с., д.х.н. Курамшина Гульнара Маратовна, кафедра физической химии химического факультета МГУ, kugamshi@phys.chem.msu.ru, тел.: +7(495)939-29-50
3. Доц., д.ф.-м.н. Пазюк Елена Александровна, кафедра физической химии химического факультета МГУ, pazyuk@phys.chem.msu.ru, тел.: +7(495)939-28-25

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - экзамена. На экзамене проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.5.

Вопросы к экзамену:

1. Особенности моделирования электронных состояний больших систем. Асимптотика зависимости объема вычислений при решении уравнений ССП с использованием разложений орбиталей по локализованным базисам от размера системы для больших систем.
2. Зависимость объема вычислений от размера многоэлектронной системы. Размерная согласованность. Нарушение размерной согласованности в ограниченных вариантах метода конфигурационного взаимодействия и кластерные разложения волновых функций.
3. Сферическая однородная дырка и функционал Дирака-Слейтера. Теоремы Хоэнберга-Кона (Леви). Уравнения Кона-Шема, обменно-корреляционный функционал Приближенные обменно-корреляционные функционалы, лестница Иакова.
4. Проблема описания дисперсионных взаимодействия в теории функционала плотности. Техника пространственного разделения кулоновского оператора. Двойные гибридные функционалы плотности.
5. Валентное приближение, остовные псевдопотенциалы. Псевдопотенциалы, согласованные по форме (сохраняющие норму). Полулокальная и сепарабельная формы псевдопотенциалов. Сепарабельные псевдопотенциалы. Релятивистские псевдопотенциалы.
6. Представление об общей структуре электронно-колебательно-вращательных уровней энергии двухатомных молекул.
7. Использование данных расчетов из первых принципов и экспериментальных данных для построения эмпирических потенциалом межатомного взаимодействия.
8. Моделирование рэвибронных спектров двухатомных молекул путем численного решения уравнения Шредингера.
9. Решение прямой и обратной спектроскопической задачи в случае двухатомных молекул.

10. Принципы отнесения колебательно-вращательных спектров двухатомных и многоатомных молекул.
11. Математические модели колебательного движения. Параметры модели. Неэмпирические методы. Полуэмпирические методы. Эмпирические модели методы.
12. Экспериментальные методы колебательной спектроскопии.
13. Групповые и характеристические частоты колебаний, нормальные колебания и внутренние координаты.
14. Пакет программ Гауссиан для персонального компьютера, основные возможности. Оптимизация геометрии и определение стабильной конфигурации многоатомной молекулы. Выбор уровня расчета. Понятие о модельной химии.
15. Использование результатов квантовохимических расчетов для интерпретации колебательного спектра многоатомной молекулы. Модели силовых полей. Выбор обобщенных координат.
16. Прямая и обратная задачи для расчета колебаний многоатомных молекул.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка	2	3	4	5
Результат				
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
<p>Знать: теоретические основы современных методов исследования структуры и свойств веществ</p> <p>Знать: возможности и ограничения расчетных методов квантовой химии при решении практических задач</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене</p>
<p>Уметь: анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы,</p> <p>Уметь: самостоятельно составлять план исследования</p> <p>Уметь: формулировать задачи моделирования молекулярных систем</p> <p>Уметь: использовать программные продукты для выполнения стандартных квантовохимических, термодинамических и кинетических расчетов</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене</p>
<p>Владеть навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения</p> <p>Владеть: навыками обоснованного выбора средств решения задач современной физической химии</p> <p>Владеть: навыками использования программных средств и работы в компьютерных сетях, использования ресурсов интернета; основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации при решении физико-химических задач</p> <p>Владеть: навыками использования профессиональных баз данных для получения информации, необходимой для физико-химического моделирования систем разной природы</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене</p>