

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)

Квантовохимические расчеты в термохимии

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) **Квантовохимические расчеты в термохимии**
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 хими-ческих 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 физико-химических методов, использующихся для расчета термодинамических и кинетических параметров молекулярных систем</p> <p>Уметь: применять современные методы компьютерного моделирования для расчета, интерпретации и предсказания строения и физико-химических свойств молекулярных систем</p> <p>Владеть: основными навыками интерпретации результатов теоретических квантово-химических расчетов</p>
СПК-5. С. Способность проводить квантовохимические, термодинамические и кинетические расчеты с использованием современных программных комплексов и баз данных	<p>Знать: возможности и ограничения различных квантово-химических методов для расчета структурных и энергетических параметров веществ</p> <p>Уметь: выбирать наиболее подходящие квантово-химические модели для решения различных термодинамических и кинетических задач</p> <p>Уметь: использовать современное программное обеспечение, предназначенное для расчета структурных и энергетических параметров веществ</p> <p>Владеть: современными квантово-химическими методами расчета</p> <p>Владеть: навыками использования профессиональных баз данных для получения информации, необходимой для физико-химического моделирования</p>

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 3 зачетных единицы, всего 108 часа, из которых 40 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (18 часов занятия лекционного типа, 18 часа – занятия семинарского типа, 2 часа – групповые консультации, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 68 часа составляет самостоятельная работа студента.

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

Обучающийся должен

Знать: основы общих курсов «Физическая химия», «Строение молекул» и «Квантовая химия»

Уметь: выявлять взаимосвязь между особенностями строения и физико-химическими свойствами вещества

Владеть: основными навыками интерпретации данных молекулярной спектроскопии и термодимического эксперимента

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. Современные возможности квантовой химии. Ознакомление с работой программ Gaussian и	10	2	2				4	6		6

GaussView. Методы описания геометрии молекул. Построение Z-матрицы. Входной файл программы Gaussian.										
Тема 2. Оптимизация геометрии. Поиск стационарных точек на поверхности потенциальной энергии и определение их характера. Конформационный анализ. Квантово-химические модели.	12	2	2				4	8		8
Тема 3. Расчет энтропии, теплоемкости и других термодинамических функций в приближении «жесткий ротатор – гармонический осциллятор». Учет симметрии молекулы и оптической изомерии. Масштабирование частот колебаний.	12	2	2				4	8		8
Тема 4. Учет вклада движений большой амплитуды при расчете термодинамических функций. Методы учета внутреннего вращения и других движений большой амплитуды. Расчет потенциалов внутреннего вращения.	12	2	2				4	8		8
Тема 5. Расчет термодинамических функций смеси изомеров или	10	2	2				4	6		6

конформеров. Расчет равновесного состава смеси конформеров. Расчет константы равновесия.										
Тема 6. Стандартный метод расчета энтальпии образования. Расчет энергии атомизации. Методы расчета. Многоуровневые экстраполяционные методы. Поправка на смесь конформеров.	12	2	2				4	8		8
Тема 7. Расчет энтальпии образования методом изодесмических реакций. Реакции разделения связей, изогирические, изодесмические, гомодесмотические реакции. Использование экспериментальных данных.	12	2	2				4	8		8
Тема 8. Расчет энтальпии образования радикалов и энергий диссоциации связей. Расчет потенциала ионизации, сродства к электрону и протону, энтальпий образования ионов.	12	2	2				4	8		8
Тема 9. Расчет константы скорости реакции. Энергия активации. Методы оптимизация геометрии переходных структур. Расчет пути реакции.	14	2	2	2			6	8		8

Промежуточная аттестация <i>зачет</i>	2					2	2			
Итого	108	18	18	2		2	40	68		68

9. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

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

Студентам предоставляется программа курса, план занятий, перечень домашних заданий, лекционные материалы и примеры решения задач. По теме каждой лекции указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы.

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. – М.: Мир, 2001.
2. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. – М. : БИНОМ, 2010.
3. Смирнова Н.А. Методы статистической термодинамики в физической химии. – М.: Высш. шк., 1982.
4. Полтораки О.М. Термодинамика в физической химии. – М.: Высш. шк., 1991.
5. Романовский Б.В. Основы химической кинетики. – М.: Экзамен, 2006.
6. Бенсон С. Основы химической кинетики. – М., Мир, 1964.

Дополнительная литература

1. Foresman J.B., Frisch A.E. Exploring chemistry with electronic structure methods. – Wallingford, CT: Gaussian, Inc., 2015.
2. Ochterski J.W. Thermochemistry in Gaussian. – <http://www.gaussian.com/>
3. Годнев И.Н. Вычисление термодинамических функций по молекулярным данным. – М.: Гостехтеориздат, 1956.
4. Кабо Г.Я., Роганов Г.Н., Френкель М.Л. Термодинамика и равновесия изомеров. – Минск: Университетское, 1986.
5. Quantum-Mechanical Predictions of Thermochemical Data. / Cioslowski J. Ed. – New York: Kluwer, 2002.

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

1. Лицензионное программное обеспечение Gaussian 16, GaussView 6, GMMX.
2. The Official Gaussian Website, <http://www.gaussian.com/>
3. Computational Chemistry Comparison and Benchmark DataBase, <http://cccbdb.nist.gov/>
4. NIST Chemistry WebBook, <http://webbook.nist.gov/chemistry>
5. NIST Chemical Kinetics Database, <http://kinetics.nist.gov/kinetics/>
6. Active Thermochemical Tables (ATcT), <https://atct.anl.gov/>

12. Язык преподавания – русский

13. Преподаватели:

в.н.с., д.х.н. Дорощева Ольга Витальевна, кафедра физической химии химического факультета МГУ,
dorofeeva@phys.chem.msu.ru, 8-495-939-52-46.

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

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

Вопросы для зачета:

1. Поверхность потенциальной энергии. Оптимизация геометрии. Поиск стационарных точек и их характеристика.
2. Экспериментальные и теоретические методы определения энтропии, теплоемкости и энтальпии образования в конденсированном и газообразном состоянии.
3. Молекулярные постоянные, необходимые для расчета энтропии, теплоемкости и других термодинамических функций методами статистической термодинамики. Квантово-химические методы, используемые для их определения.
4. Учет симметрии и оптической изомерии при расчете термодинамических функций.
5. Движения большой амплитуды (внутреннее вращение, инверсия и псевдовращение) и их учет при расчете термодинамических функций.

6. Приближенный учет внутреннего вращения путем рассмотрения смеси равновесных конформеров.
7. Распределение Больцмана и расчет равновесного состава конформеров в газе.
8. Квантово-химические модели, использующиеся для расчета термодинамических и кинетических параметров. Выбор модели в зависимости от поставленной задачи.
9. На примере двух молекул (например, аминоадамантиана и гексанола) оценить точность квантово-химического расчета энтропии и энтальпии образования в газовой фазе.
10. Расчет энтальпии образования на основе реакций атомизации и изодесмических реакций. Достоинства и недостатки двух подходов.
11. Современные квантово-химические методы, использующиеся для расчета энтальпии образования.
12. Учет конформационного равновесия при расчете энтальпии образования.
13. Поправка на нулевые колебания и термическая поправка. Расчет энтальпии образования при 0 К и 298.15 К.
14. Реакции разделения связей, изодесмические, гомодесмотические, изогирические и другие реакции, использующиеся при расчете энтальпии образования. Выбор квантово-химической модели при использовании метода изодесмических реакций.
15. Расчет энергий диссоциации связей.
16. Расчет энергии ионизации, сродства к электрону, сродства к протону. Расчет энтальпии образования ионов.
17. Расчет константы скорости: методы оптимизации геометрии переходных структур и расчет пути реакции.

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 не принципиального 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 физико-химических методов, использующихся для расчета термодинамических и кинетических параметров молекулярных систем</p> <p>Знать: возможности и ограничения различных квантово-химических методов для расчета структурных и энергетических параметров веществ</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</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: применять современные методы компьютерного моделирования для расчета, интерпретации и предсказания строения и физико-химических свойств молекулярных систем</p> <p>Уметь: выбирать наиболее подходящие квантово-химические модели для решения различных термодинамических и кинетических задач</p> <p>Уметь: использовать современное программное обеспечение, предназначенное для расчета структурных и энергетических параметров веществ</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</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: основными навыками интерпретации результатов теоретических квантово-химических расчетов</p> <p>Владеть: современными квантово-химическими методами расчета</p> <p>Владеть: навыками использования профессиональных баз данных для получения информации, необходимой для физико-химического моделирования</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>