

Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Б1.О.03.01.03 ОБЩАЯ И НЕОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

Квантовая механика и квантовая химия

наименование дисциплины (модуля) в соответствии с учебным планом

Направление подготовки / специальность

04.03.01 Химия

Направленность (профиль)

04.03.01.32 Физическая химия

Форма обучения

очная

Год набора

2019

Красноярск 2022

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Программу составили _____

канд.хим.наук, доцент, Томилин Ф.Н.

должность, инициалы, фамилия

1 Цели и задачи изучения дисциплины

1.1 Цель преподавания дисциплины

Цель изучения дисциплины – получение обучающимися базовых сведений по квантовой химии, необходимых для освоения специальных дисциплин, а по окончании обучения в вузе – для грамотной, эффективной работы в сфере профессиональной деятельности.

1.2 Задачи изучения дисциплины

Задачами курса являются формирование у обучающихся представления о современных методах квантовой химии, а также возможностях различных квантово-химических методов расчета для моделирования элементарных стадий химических реакций и процессов физико-химического синтеза.

В рамках курса обучающиеся должны познакомиться с различными методами современной квантовой химии: неэмпирическими, теорией функционала плотности, полуэмпирическими методами, молекулярной механикой; иметь представление о приближениях и допущениях заложенных в квантово-химические методы, о возможностях методов и целесообразности их использования для моделирования различных химических реакций.

1.3 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Запланированные результаты обучения по дисциплине
	ОПК-3: Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники
	УК-1: Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач

1.4 Особенности реализации дисциплины

Язык реализации дисциплины: Русский.

Дисциплина (модуль) реализуется без применения ЭО и ДОТ.

2. Объем дисциплины (модуля)

Вид учебной работы	Всего, зачетных единиц (акад.час)	е
		1
Контактная работа с преподавателем:	1,89 (68)	
занятия лекционного типа	0,94 (34)	
практические занятия	0,94 (34)	
Самостоятельная работа обучающихся:	1,11 (40)	
курсовое проектирование (КП)	Нет	
курсовая работа (КР)	Нет	

3 Содержание дисциплины (модуля)

3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

№ п/п		Модули, темы (разделы) дисциплины		Контактная работа, ак. час.							
				Занятия лекционного типа		Занятия семинарского типа				Самостоятельная работа, ак. час.	
						Семинары и/или Практические занятия		Лабораторные работы и/или Практикумы			
				Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС	Всего	В том числе в ЭИОС
1. Введение и математический аппарат квантовой химии											
		1. Предмет вычислительной теоретической химии. Современная квантовая химия как теоретический фундамент химической науки. Качественные теории строения и реакционной способности. Методы моделирования структуры материалов и супермолекул, неэмпирические, полуэмпирические и молекулярно-механические методы. Расчет физических свойств молекул и материалов. Компьютерные программы моделирования структуры и свойств. Предмет курса, основные объекты и разделы.		2							

2. Операторы. Наблюдаемые. Среднее значение и дисперсия. Плотность вероятности. Соотношение неопределенностей. Представление наблюдаемых физических величин: операторы координаты, импульса, момента импульса, кинетической и потенциальной энергии, гамильтониан. Задача на собственные значения. Эрмитовы операторы и их собственные значения. Коммутационные соотношения.			9					
3. Начала квантовой теории. Атом Бора. Гипотеза де Бройля. Квантовые состояния. Волновые функции. Наблюдаемые. Интерпретация Борна. Постулаты квантовой теории. Уравнение Шредингера. Примеры решения уравнения Шредингера: прямоугольная потенциальная яма, гармонический осциллятор.	2							
4. Многоэлектронные атомы. Приближение независимых электронов. Определители Слэйтера. Энергия определителя Слэйтера. Полные орбитальные и спиновые квантовые числа. Метод самосогласованного поля. Метод Хартри-Фока. Канонические и неканонические орбитали. Средство к электрону и потенциал ионизации. Орбитальные энергии и полная энергия. Теорема Купманса.	6							
5. Теория момента импульса. Переход к сферической системе координат. Присоединенные полиномы Лежандра. Собственные функции оператора L_z . Коммутационные соотношения для компонент момента импульса. Правила сложения. Атом водорода.	3							
6. Углубленное изучение аспектов использования в теории и на практике квантово-механических подходов к описанию состояния электрона.							9	

7. Электрон в кулоновском поле: атом водорода. Разделение переменных. Радиальные и угловые функции. Орбитали. Водородоподобные атомы. Понятие об одноэлектронных состояниях. Вырождение одноэлектронных состояний.			6					
8. Решение задач по заданным преподавателем разделам							9	
2. Методики расчета молекулярных систем								
1. Молекулярные системы. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Представление молекулярных орбиталей (МО) как линейной комбинации атомных (ЛКАО). Разрыхляющие и связывающие молекулярные орбитали. Метод Рутана ССП МО ЛКАО. Представление о неэмпирических и полуэмпирических методах. Классификация методов. Сходимость к самосогласованному полю. Процедура энергетического сдвига вакантных состояний.			6					
2. Типы базисов атомных орбиталей. Приближенные аналитические функции атомных орбиталей Слэйтера и Гаусса. Контрактированные базисные наборы. Базисные наборы Попла и базисные наборы Хузинаги-Даннинга. Базисные наборы атомных натуральных орбиталей. Анализ орбитальных заселенностей. Заселенности Малликена и Левдина. Локализованные орбитали.			3					
3. Проработка лекционного материала и дополнительное изучение неэмпирических и полуэмпирических методов (метод функционала плотности, пост-хартри-фоковские схемы).							9	

<p>4. Современное программное и информационное обеспечение квантово-химических расчетов. Программные комплексы и их основные характеристики. Подготовка данных для квантово-химических расчетов. (Ознакомление с основными характеристиками и функциональными возможностями современных пакетов квантово-химических программ Games. Интернет адреса сайтов разработчиков пакетов программ и доступ к обновлениям документации. Библиотеки базисных наборов и псевдопотенциалов. Программы визуализации молекулярных структур. Запуск программ. Подготовка файлов исходных параметров простейших молекулярных систем, визуализация стартовых молекулярных структур.).</p>			6					
<p>5. Метод функционала плотности. Теорема Хохенберга-Кона. Приближение локального функционала плотности. Метод Ха. VWN-параметризация. Обобщенное градиентное приближение. Гибридные функционалы. Преимущества и недостатки метода функционала плотности. Программные реализации метода функционала плотности.</p>	3							
<p>6. Неэмпирические методы учета электронных корреляций. (Пост-хартри-фоковские схемы). Эффекты электронной корреляции. Слейтеровские детерминанты возбужденных состояний. Конфигурационное взаимодействие. Вычисление матричных элементов. Многоконфигурационное самосогласованное поле. Самосогласованное поле полного активного пространства. Теория возмущений Моллера-Плессета. Сопряженные уравнения кластерного оператора генерации возбужденных состояний.</p>	3							

<p>7. Наборы базисных функций (и псевдопотенциалов) для неэмпирических квантово-химических расчетов. Классификация базисных наборов. Сегментная и обобщенная схема контракции базиса. Принцип последовательного улучшения качества базиса. (Определение базисных наборов Попла и Хузина-Даннинга. Расчеты атомов для построения схем обобщенной контракции. Подбор псевдопотенциалов и базиса для расчета систем тяжелых элементов. Построения схем последовательного улучшения качества базиса)</p>			9					
<p>8. Теоретическое моделирование профиля реакций. Теория переходного состояния. Равновесные конфигурации молекул и седловые точки. Расчет составляющих энергии Гиббса. Анализ поверхности потенциальной энергии. Методы оптимизации геометрии. Поиск по методу Ньютона-Рафсона. Расчет и диагонализация гессиана. Оптимизация структуры переходных состояний. Путь реакции и координата реакции. Сканирование поверхности потенциальной энергии.</p>	3							
<p>9. Зонная теория. Периодические граничные условия. Разложение волновых функций по плоским волнам. Зонная картина электронного строения. Функции Блоха. Функции Ванье. Проводники и изоляторы. Нарушения симметрии. Электронная структура вблизи поверхности. Особенности расчетов полубесконечных кристаллов.</p>	3							

10. Варианты расчета энергий связи при учете корреляционных эффектов по теории возмущения Мюллера-Плессета второго порядка. Расчеты комплексов переходных металлов. (Ознакомление с особенностями расчетов координационных соединений. Построение диаграмм электронных уровней. Анализ распределения электронной плотности.			4					
11. Выполнение, оформление и подготовка к защите расчетно-графических заданий.							13	
12.								
Всего	34		34				40	

4 Учебно-методическое обеспечение дисциплины

4.1 Печатные и электронные издания:

1. Кузубов А. А, Елисеева Н. С., Томилин Ф.Н, Шубин А. А. Квантовая механика и квантовая химия: учеб.-метод. пособие [для студентов напр. 020100.68 «Химия»](Красноярск: СФУ).
2. Федоров А. С., Кузубов А. А, Елисеева Н. С., Попов З. И., Высотин М. А. Квантовая механика и квантовая химия. Ч. 2. Проведение квантово-химических расчетов с использованием программного комплекса VASP 5.2: учеб.-метод. пособие [для студентов напр. 020100.68 «Химия»] (Красноярск: СФУ).
3. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие(Москва: БИНОМ).
4. Харгиттай И. Симметрия глазами химика: перевод с английского (Москва: Мир).
5. Шиврин Г. Н. Прикладная квантовая химия: монография(Рязань: Голос губернии).
6. Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Теория строения молекул: учебное пособие для студентов вузов(Ростов-на-Дону: Феникс).
7. Барановский В. И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для студентов вузов по химическим специальностям(Москва: Академия).
8. Фларри Р. Л., Бродский А. М. Квантовая химия. Введение: [учебное пособие](Москва: Мир).
9. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия: учебник (Москва: Мир).
10. Салем Л., Бутин К. П. Электроны в химических реакциях: перевод с английского(Москва: Мир).

4.2 Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение, в том числе отечественного производства (программное обеспечение, на которое университет имеет лицензию, а также свободно распространяемое программное обеспечение):

1. Пакет прикладных программ для квантово-химического моделирования:
2. GAMESS (свободная лицензия)
3. NWCHEM (свободная лицензия)
4. OpenMX (свободная лицензия)
5. PWSCF (свободная лицензия)
6. MOPAC (свободная лицензия)
7. dftb+ (свободная лицензия)
8. Abinit (свободная лицензия)
9. ORCA (свободная лицензия)
10. Пакет прикладных программ для визуализации и анализа результатов квантово-химического моделирования:

11. Avogadro (свободная лицензия)
12. VESTA (свободная лицензия)
13. ArgusLab (свободная лицензия)
14. MacMolPlt (свободная лицензия)
15. Пакет MatLab.
16. Сопровождение учебного процесса требует применение программного обеспечения, позволяющее создавать, редактировать и представлять текстовый и иллюстративный материал: MSOffice (MSWord, MExcel, MSPowerPoint).

4.3 Интернет-ресурсы, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы:

5 Фонд оценочных средств

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

6 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Расчетно-графический комплекс для проведения квантово-химического моделирования (32 процессорных ядра Intel Core)

Сервер STSS Flagman (64 процессорных ядра AMD)

Набор персональных компьютеров (3 шт.)

Удаленный доступ к ресурсам Суперкомпьютера СФУ

Компьютерный класс с доступом машин в сеть Internet.

Лекционная аудитория с возможностью проецирования на мультимедийный экран презентации лекции и примеров работы с интерактивными базами данных.