

Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

СОГЛАСОВАНО

Заведующий кафедрой

Кафедра физической и
неорганической химии
(ФиНХ_ХМФ)

наименование кафедры

подпись, инициалы, фамилия

«___» _____ 20__ г.

институт, реализующий ОП ВО

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой

Кафедра физической и
неорганической химии
(ФиНХ_ХМФ)

наименование кафедры

доцент, канд.хим.наук Л.Т.
Денисова

подпись, инициалы, фамилия

«___» _____ 20__ г.

институт, реализующий дисциплину

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
ОБЩАЯ И НЕОРГАНИЧЕСКАЯ
ХИМИЯ
КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И
КВАНТОВАЯ ХИМИЯ**

Дисциплина Б1.О.03.01.03 ОБЩАЯ И НЕОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ
Квантовая механика и квантовая химия

Направление подготовки /
специальность _____

Направленность
(профиль) _____

Форма обучения

очная

Год набора

2019

Красноярск 2021

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования с учетом профессиональных стандартов по укрупненной группе

040000 «ХИМИЯ»

Направление подготовки /специальность (профиль/специализация)

04.03.01 Химия профиль подготовки 04.03.01.32 Физическая химия

Программу
составили

канд.хим.наук, доцент, Томилин Ф.Н.

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

УК-1:Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	
Уровень 1	методы поиска и критического анализа информации для решения поставленных задач
Уровень 1	искать, анализировать и систематизировать информацию для решения поставленных задач
Уровень 1	системным подходом для решения поставленных задач
ОПК-3:Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	
Уровень 1	знать теоретические основы расчетных методов для изучения свойств веществ и процессов
Уровень 1	применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с использованием современной вычислительной техники
Уровень 1	владеть современной вычислительной техникой для изучения свойств веществ и процессов с их участием

1.4 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина "Квантовая механика и квантовая химия" является обязательной

Общая и неорганическая химия
Дифференциальные уравнения
Математический анализ
Высшая алгебра

1.5 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)	Семестр
		6
Общая трудоемкость дисциплины	3 (108)	3 (108)
Контактная работа с преподавателем:	1,89 (68)	1,89 (68)
занятия лекционного типа	0,94 (34)	0,94 (34)
занятия семинарского типа		
в том числе: семинары		
практические занятия	0,94 (34)	0,94 (34)
практикумы		
лабораторные работы		
другие виды контактной работы		
в том числе: групповые консультации		
индивидуальные консультации		
иная внеаудиторная контактная работа:		
групповые занятия		
индивидуальные занятия		
Самостоятельная работа обучающихся:	1,11 (40)	1,11 (40)
изучение теоретического курса (ТО)		
расчетно-графические задания, задачи (РГЗ)		
реферат, эссе (Р)		
курсовое проектирование (КП)	Нет	Нет
курсовая работа (КР)	Нет	Нет
Промежуточная аттестация (Зачёт)		

3 Содержание дисциплины (модуля)

3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

№ п/п	Модули, темы (разделы) дисциплины	Занятия лекционного типа (акад. час)	Занятия семинарского типа		Самостоятельная работа, (акад. час)	Формируемые компетенции
			Семинары и/или Практические занятия (акад. час)	Лабораторные работы и/или Практикумы (акад. час)		
1	2	3	4	5	6	7
1	Введение и математический аппарат квантовой химии	13	15	0	18	
2	Методики расчета молекулярных систем	21	19	0	22	
Всего		34	34	0	40	

3.2 Занятия лекционного типа

№ п/п	№ разделы дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме

1	1	<p>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.</p>	2	0	0
2	1	<p>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.</p>	2	0	0

3	1	<p>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.</p>	6	0	0
4	1	<p>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.</p>	3	0	0

5	2	<p>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.</p>	6	1	0
6	2	<p>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. Засиленности Малликена и Левдина. Локализованные орбитали.</p>	3	1	0

7	2	<p>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	1	0
8	2	<p>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	1	0

9	2	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.	3	1	0
10	2	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.	3	1	0
Всего			24	6	0

3.3 Занятия семинарского типа

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме

1	1	<p>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.</p>	9	0	0
2	1	<p>Электрон в кулоновском поле: атом водорода. Разделение переменных. Радиальные и угловые функции. Орбитали. Водородоподобные атомы. Понятие об одноэлектронных состояниях. Вырождение одноэлектронных состояний.</p>	6	0	0

3	2	<p>Современное программное и информационное обеспечение квантово-химических расчетов. Программные комплексы и их основные характеристики.</p> <p>Подготовка данных для квантово-химических расчетов. (Ознакомление с основными характеристиками и функциональными возможностями современных пакетов квантово-химических программ Games.</p> <p>Интернет адреса сайтов разработчиков пакетов программ и доступ к обновлениям документации. Библиотеки базисных наборов и псевдопотенциалов.</p> <p>Программы визуализации молекулярных структур.</p> <p>Запуск программ.</p> <p>Подготовка файлов исходных параметров простейших молекулярных систем, визуализация стартовых молекулярных структур.).</p>	6	0	0
---	---	--	---	---	---

4	2	Наборы базисных функций (и псевдопотенциалов) для неэмпирических квантово-химических расчетов. Классификация базисных наборов. Сегментная и обобщенная схема контрактации базиса. Принцип последовательного улучшения качества базиса. (Определение базисных наборов Попла и Хузинаги-Даннинга. Расчеты атомов для построения схем обобщенной контрактации. Подбор псевдопотенциалов и базиса для расчета систем тяжелых элементов. Построения схем последовательного улучшения качества базиса)	9	0	0
5	2	Варианты расчета энергий связи при учете корреляционных эффектов по теории возмущения Мøллера-Плессета второго порядка. Расчеты комплексов переходных металлов. (Ознакомление с особенностями расчетов координационных соединений. Построение диаграмм электронных уровней. Анализ распределения электронной плотности.	4	0	0
Всего			24	0	0

3.4 Лабораторные занятия

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
Всего					

5 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

6 Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

6.1. Основная литература			
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л1.1	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, 2013
Л1.2	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, 2013
Л1.3	Цирельсон В. Г.	Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие	Москва: БИНОМ, 2014
6.2. Дополнительная литература			
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л2.1	Харгиттай И.	Симметрия глазами химика: перевод с английского	Москва: Мир, 1989
Л2.2	Шиврин Г. Н.	Прикладная квантовая химия: монография	Рязань: Голос губернии, 2009
Л2.3	Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М.	Теория строения молекул: учебное пособие для студентов вузов	Ростов-на-Дону: Феникс, 1997
Л2.4	Барановский В. И.	Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для студентов вузов по химическим специальностям	Москва: Академия, 2008
Л2.5	Фларри Р. Л., Бродский А. М.	Квантовая химия. Введение: [учебное пособие]	Москва: Мир, 1985
Л2.6	Степанов Н. Ф.	Квантовая механика и квантовая химия: учебник	Москва: Мир, 2001
Л2.7	Салем Л., Бутин К. П.	Электроны в химических реакциях: перевод с английского	Москва: Мир, 1985

7 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Э1	Gordon M.S. Информационный сайт	http://www.msg.ameslab.gov/gamess/
----	---------------------------------	---

	разработчиков программного комплекса "GAMESS"	
Э2	База данных кристаллических структур	http://www.crystallography.net/result.php
Э3	Образовательный ресурс кафедры квантовой химии, РХТУ им. Д.И. Менделеева	http://quant.distant.ru/study.htm
Э4	База данных базисных наборов	https://bse.pnl.gov/bse/portal
Э5	База данных структуры и свойств химических соединений	http://www.webelements.com

8 Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Самостоятельная работа предусматривает подготовку учащегося к текущим аудиторным занятиям. Результаты этой подготовки проявляются в активности на занятиях, выполнении контрольных работ, расчетно-графических заданий и других форм текущего контроля. Баллы, полученные обучающимся по результатам аудиторной работы, формируют рейтинговую оценку текущей успеваемости обучающегося по дисциплине.

Самостоятельная работа предусматривает:

Проработку лекционного материала и написание реферата – 18 ч.

Решение задач (в первом модуле) – 9 ч.

Выполнение, оформление и подготовку к защите расчетно-графических заданий (во втором модуле) – 9 ч.

При самостоятельном изучении теоретического материала, при подготовке к занятиям, промежуточному контролю и при решении задач студенты используют литературу, рекомендованную преподавателем.

При решении задач рекомендуется пользоваться примерами, разобранными на занятии, а также дополнительной литературой:

Расчетно-графические задания выдаются преподавателями, ведущими практические занятия. РГЗ предлагаются на основе примеров, разобранных на практических занятиях с измененными начальными условиями. Каждый студент получает 4 различных расчетно-графических задания.

При подготовке к защите расчетно-графических заданий студенты помимо рекомендованной и дополнительной литературы проводят литературный поиск, используя библиотеки и Интернет-ресурсы.

Расчетно-графические задания оформляются в соответствии с требованиями, перечисленными в учебном пособии по практикуму. Основные требования следующие:

РГЗ должна быть оформлена на отдельных листах с указанием ф.и.о. студента и номера группы.

РГЗ должен содержать цель работы, краткое теоретическое введение с формулами, на которые далее будут ссылки при расчетах; результаты опытов и их обработку (все предусмотренные в работе графики, таблицы и расчеты); выводы.

Каждый рисунок или таблица должны иметь подпись, содержащую всю информацию, необходимую для его восприятия и анализа полученных данных.

Отчет, по возможности, должен содержать результат сравнения рассчитанных параметров с экспериментальными значениями.

Защита расчетно-графических заданий проводится во время аудиторного занятия.

1 Федоров А.С., Квантовая механика и квантовая химия. Ч. 2. Проведение квантово - химических расчётов с использованием программного комплекса VASP 5.2: учебно-методическое пособие [Электронный ресурс] /А.С. Федоров, А.А. Кузубов, Н.С. Елисеева, З.И. Попов, М.А. Высотин. – Электрон.дан. – Красноярск: Сиб. федер. ун-т, 2013. — Режим доступа: <http://lib3.sfu-kras.ru/ft/lib2/elib/b24/i586277.pdf?Z21ID=24116398305A76890D11E33A10127049&P21DBN=BOOK1&Z21MFN=%D0%91%D0%91%D0%9A%2024.5%2F%D0%9A321-586277>

2 Кузубов А.А., Квантовая механика и квантовая химия : учеб.-метод. пособие: в 2 ч. Ч. 1. [Электронный ресурс] / А.А. Кузубов, Н.С. Елисеева, Ф.Н. Томилин, А.А. Шубин. – Электрон. дан. – Красноярск: Сиб. федер. ун-т, 2013. — Режим доступа: <http://lib3.sfu-kras.ru/ft/lib2/elib/b24/i-582537.pdf?Z21ID=24116398305A7689081063881013740B&P21DBN=BOOK1&Z21MFN=%D0%91%D0%91%D0%9A%2024.5%2F%D0%9A321-582537>

9 Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю) (при необходимости)

9.1 Перечень необходимого программного обеспечения

9.1.1	Пакет прикладных программ для квантово-химического моделирования:
9.1.2	GAMESS (свободная лицензия)
9.1.3	NWCHEM (свободная лицензия)
9.1.4	OpenMX (свободная лицензия)
9.1.5	PWSCF (свободная лицензия)
9.1.6	МОРАС (свободная лицензия)
9.1.7	dftb+ (свободная лицензия)

9.1.8	Abinit (свободная лицензия)
9.1.9	ORCA (свободная лицензия)
9.1.1 0	Пакет прикладных программ для визуализации и анализа результатов квантово-химического моделирования:
9.1.1 1	Avogadro (свободная лицензия)
9.1.1 2	VESTA (свободная лицензия)
9.1.1 3	ArgusLab (свободная лицензия)
9.1.1 4	MacMolPlt (свободная лицензия)
9.1.1 5	Пакет MatLab.
9.1.1 6	Сопровождение учебного процесса требует применение программное обеспечения, позволяющее создавать, редактировать и представлять текстовый и иллюстративный материал: MSOffice (MSWord, MSeXcel, MSPowerPoint).

9.2 Перечень необходимых информационных справочных систем

10 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.