

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)

Практическая квантовая химия

Уровень высшего образования:
Специалитет

Направление подготовки (специальность):
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:
Химическая кинетика

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) **Спецпрактикум «Практическая квантовая химия»**
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, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Компетенция	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
СПК-1.С. Способность анализировать экспериментальные кинетические данные, строить кинетические схемы и определять константы скорости и равновесия для различных реакций	Знать: теоретические основы современных методов исследования структуры и свойств веществ Уметь: выбирать направление экспериментального физико-химического исследования, адекватное поставленной задаче Уметь: оценить основные источники ошибок и коректность экспериментальных данных Владеть: навыками практических квантовохимических расчетов кинетики процессов
СПК-2.С. Способность выбирать теоретические модели для описания конкретного химического процесса с использованием аппарата современных теорий	Знать: основные модельные представления, применяемые для описания свойств и структуры молекулярных систем Уметь: выбрать адекватную теоретическую модель для описания конкретной системы Уметь: оценить основные источники ошибок и достоверность рассчитываемых величин

3. Объем дисциплины (модуля) составляет 4 зачетных единицы, всего 144 часа, из которых 114 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (84 часа - лабораторные занятия, 14 часов – групповые консультации, 16 часов – индивидуальные консультации, 4 часа - промежуточный контроль успеваемости), 30 часов составляет самостоятельная работа студента.

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

Обучающийся должен

- знать основы физической химии, квантовой химии, строения молекул;
- уметь работать с файловой системой компьютера и базовыми компьютерными программами;
- владеть навыками анализа массивов данных;

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. Метод Хартри-Фока. Расчет полной энергии и других свойств системы с фиксированной геометрией. Структура и синтаксис исходного (input) файла. Визуализация геометрической структуры и молекулярных орбиталей.	18		12	2	2		16	2		2
Тема 2. Электронная корреляция. Теория возмущений. Метод Меллера-Плессе. Энергия корреляции.	18		12	2	2		16	2		2
Тема 3. Теория функционала плотности. Сравнение функционалов.	18		12	2	2		16	2		2
Тема 4. Оптимизация геометрии. Поверхность потенциальной энер-	18		12	2	2		16	2		2

гии (ППЭ). Стационарные точки на ППЭ.										
Тема 5. Расчет частот колебаний многоатомных молекул. Гессиан. Силовые константы. Условия, отвечающие максимумам, минимумам и седловым точкам на ППЭ.	20		12	2	2		16	4		4
Тема 6. Направление химической реакции. Частичная оптимизация геометрии. Расчет термодинамических параметров.	18		12	2	2		16	2		2
Тема 7. Учет влияния растворителя. Метод супермолекулы. Континуальная модель.	16		12		2		14	2		2
Промежуточная аттестация <i>Зачет</i>	18			2	2		4	14		14
Итого	144		84	14	16		114	30		30

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;
- творческое задание (профессорская задача).

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

Презентации к занятиям, составленные преподавателем.

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, 2001.519 С.
2. Минкин В. И., Симкин Б. Я. , Миняев Р. М. Теория строения молекул: Учеб. пособие для вузов (2-е изд., перераб. и доп.) Ростов н/Д: Феникс, 1997. — 558 с.

Дополнительная литература

1. Frank Jensen. Introduction to Computational Chemistry. Second Edition. West Sussex, England: Wiley. 2007. 599 P.
Интернет-ресурсы
2. С.Л.Хурсан. Лекции по квантовой химии. <http://www.qchem.ru/lectures/>

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

1. Neese, F. (2012) The ORCA program system, Wiley Interdiscip. Rev.: Comput. Mol. Sci., 2, 73-78 (<https://cec.mpg.de/forum>).
2. ChemCraft (Grigoriy A. Zhurko) (<http://www.chemcraftprog.com/>)

12. Язык преподавания – русский

13. Преподаватели: доцент, д.х.н., в.н.с. Голубева Елена Николаевна, кафедра химической кинетики химического факультета МГУ, legol@mail.ru, 9391012

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 для зачета:

1. Основные приближения квантовой химии.
2. Что является результатом любых квантово-химических расчетов?
3. Что является основным методом МО-ЛКАО?

4. Построение и классификация базисных наборов.
5. Методы расчета открытых оболочек.
6. Электронная корреляция и методы ее учета.
7. Понятие о функционале плотности и базисном наборе.
8. Стационарные точки на поверхности потенциальной энергии, их свойства.
9. Способы моделирования химических реакций методами квантовой химии.
10. Основные элементы входных файлов для расчетов.
11. Способы учета влияния растворителя.
12. Визуализация результатов расчета с помощью дополнительных программ

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 \ Результат	2	3	4	5
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
Знать: теоретические основы современных методов исследования структуры и свойств веществ Знать: основные модельные представления, применяемые для описания свойств и структуры молекулярных систем	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете

Уметь: выбирать направление экспериментального физико-химического исследования, адекватное поставленной задаче Уметь: оценить основные источники ошибок и корректность экспериментальных данных Уметь: выбрать адекватную теоретическую модель для описания конкретной системы Уметь: оценить основные источники ошибок и достоверность рассчитываемых величин	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете
Владеть: навыками практических квантовохимических расчетов кинетики процессов	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете