

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

УТВЕРЖДАЮ
Декан химического факультета,
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/
«31» августа 2021 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
Квантовая химия

Уровень высшего образования:
Специалитет

Направление подготовки (специальность):
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:
Аналитическая химия, Биоорганическая химия, Высокомолекулярные соединения, Коллоидная химия, Лазерная химия, Медицинская химия и тонкий органический синтез, Нанобиоматериалы и нанобиотехнологии, Неорганическая химия, Нефтехимия, Органическая химия, Радиохимия, Физическая химия, Фундаментальная и прикладная энзимология, Химия ионных и молекулярных систем, Химическая кинетика, Химия высоких энергий, Химия и технология веществ и материалов, Химия твердого тела, Электрохимия

Форма обучения:
очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №7 от 07.07.2021)

Москва 2021

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 29 декабря 2018 года № 1770.

Год (годы) приема на обучение 2021/2022

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: базовая часть ООП, блок ХД, модуль «Квантовая химия».

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция	Индикаторы достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
УК-1.С Способен формулировать научно обоснованные гипотезы, создавать теоретические модели явлений и процессов, применять методологию научного познания в профессиональной деятельности	УК-1.С.1 Осуществляет поиск, критический анализ и синтез информации с использованием требований системного подхода	Уметь: находить необходимые для работы сведения в открытых источниках информации Уметь: сопоставлять информацию из разных источников, оценивать ее достоверность
	УК-1.С.2 Формулирует научно обоснованные гипотезы, создает теоретические модели явлений и процессов	Уметь: формулировать научные гипотезы при обсуждении литературных и собственных данных
УК-6. Способен применять современные коммуникативные технологии, в том числе, на иностранном языке (иностранных языках), для академического и профессионального взаимодействия	УК-6.С.2 Осуществляет письменную и устную коммуникацию на русском и иностранном языке в профессиональной сфере	Уметь: выбирать коммуникативно приемлемый стиль делового общения, использовать необходимые языковые средства, тактики и стратегии для решения коммуникативных задач в академической и профессиональной сферах
	УК-6.С.5. Работает с текстами разного уровня сложности, отвечающими задачам профессиональной деятельности	Уметь: работать с учебными и научными текстами разного уровня сложности, отвечающих задачам профессиональной деятельности
УК-7. Способен использовать современные информационно-коммуникационные технологии в академической и профессиональной сферах	УК-7.С.1 Использует современные информационные технологии для обмена информацией в деловой и профессиональной сфере с учетом основных требований информационной безопасности	Уметь: пользоваться программными средствами, автоматизирующими обработку данных (управление базами данных, статистическая обработка, визуализация и т.п.) Владеть: навыками обмена профессиональной информации с учетом основных требований информационной безопасности

<p>ОПК-1.С. Способен решать современные проблемы фундаментальной и прикладной химии, используя методологию научного подхода и систему фундаментальных химических понятий и законов</p>	<p>ОПК-1.С.1. Воспринимает информацию химического содержания, систематизирует и анализирует ее, оценивает актуальность и степень новизны данных</p>	<p>Знать: условия выделения уравнений, определяющих стационарные состояния электронной и ядерной подсистем молекул; основы одноэлектронного приближения, его ограничения и недостатки и способы уточнения описания электронного состояния молекул; способы получения данных, характеризующих устойчивость, особенности электронного строения и реакционную способность молекул Уметь: формулировать и решать конкретные задачи с использованием методов, изученных в курсе квантовой химии</p>
<p>ОПК-3.С. Владеет методами регистрации и обработки результатов экспериментов, в том числе, полученных на современном научном оборудовании</p>	<p>ОПК-3.С.2. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений</p>	<p>Знать: требования к оформлению и представлению результатов квантово-химических расчетных работ Уметь: получать структурные и энергетические данные, проводить их математическую обработку Уметь: проводить математическую обработку структурных и энергетических данных, обобщать полученные результаты Владеть: навыками оформления протоколов результатов изучения структурных и энергетических характеристик молекул</p>
<p>ОПК-4.С. Способен создавать математические модели профессиональных задач, учитывать ограничения и границы применимости моделей, интерпретировать полученные математические результаты</p>	<p>ОПК-4.С.1 Предлагает математические и (или) физические модели химических процессов</p> <p>ОПК-4.С.2 Грамотно интерпретирует математические результаты расчета характеристик (свойств, параметров) химических объектов</p>	<p>Знать: математические и физические модели, используемые при решении типовых задач Владеть: навыками физико-математического моделирования свойств химических объектов и процессов с их участием</p> <p>Знать: ограничения и границы применимости физических и математических моделей в химии Уметь: интерпретировать результаты физико-математического моделирования свойств химических объектов</p>

<p>ОПК-5.С. Способен использовать современные расчетно-теоретические методы изучения свойств веществ и процессов с их участием при решении профессиональных задач</p>	<p>ОПК-5.С.1. Оценивает свойства веществ и материалов, прогнозирует результаты химических процессов с использованием современных расчетно-теоретических методов и представлений</p>	<p>Знать: структурные и энергетические характеристики молекулярных систем, которые могут быть оценены с использованием современных квантовохимических методов Уметь: оценить корректность результатов теоретических расчетов структурных и энергетических характеристик молекулярных систем</p>
<p>ОПК-6.С. Способен использовать в профессиональной деятельности базовые знания в области физики и математики</p>	<p>ОПК-6.С.3. Интерпретирует результаты химических наблюдений с использованием физических законов и представлений</p>	<p>Уметь: использовать физические законы и представления при интерпретации уравнений квантовой химии и результатов, полученных при их решении Уметь: проводить необходимые математические преобразования при решении задач квантовой химии Владеть: навыками использования базовых физических знаний при решении химических задач</p>
<p>ОПК-7.С. Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности</p>	<p>ОПК-7.С.1 Использует современные компьютерные технологии при сборе информации химического профиля с использованием общих и профессиональных баз данных</p>	<p>Знать: основные базы данных в области структурной и энергетической информации Уметь: корректно составлять поисковый запрос информации структурно-энергетического содержания Владеть: навыками работы с профессиональными базами данных структурно-энергетического профиля</p>
	<p>ОПК-7.С.2 Использует современные компьютерные технологии при анализе, обработке и представлении результатов профессиональной деятельности</p>	<p>Уметь: пользоваться программными средствами, автоматизирующими обработку данных (управление базами данных, статистическая обработка, визуализация и т.п.)</p>
<p>ОПК-9.С. Способен представлять результаты профессиональной деятельности в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе</p>	<p>ОПК-9.С.1. Представляет результаты работы в виде отчета по стандартной форме на русском языке</p>	<p>Знать: требования к оформлению и представлению результатов работ в области квантовой химии</p>

3. Объем дисциплины (модуля) 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 зачетные единицы, всего 144 часа, из которых 84 часа составляет контактная работа студента с преподавателем (36 часов занятия лекционного типа, 36 часов занятия семинарского типа, 4 часа групповых консультаций, 8 часов мероприятий текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации), 60 часов составляет самостоятельная работа учащегося.

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

Для того чтобы формирование данной компетенции было возможно, обучающийся должен

знать: основы математического анализа, линейной алгебры, теории вероятности, методов решения дифференциальных уравнений и уравнений математической физики, а также теоретической механики и квантовой механики в объеме соответствующих курсов Химического факультета МГУ;

уметь: формулировать и решать конкретные задачи на основе законов и закономерностей, усвоенных в различных курсах; получать расчетные оценки искомых величин, проводить их математическую обработку, обобщать полученные результаты;

владеть: расчетными методами решения дифференциальных и интегро-дифференциальных уравнений, навыками поиска необходимых данных в открытых источниках (в том числе, в информационных базах данных).

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной атте-	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. ит.п.	Всего
Тема 1. Молекулярная задача	6	2	2				4	2		2
Тема 2. Описание химических превращений	7	2	3				5	2		2
Тема 3. Симметрия.	7	2	3				5	2		2
Тема 4. Симметрия электронных волновых функций	6	2	2				4	2		2
Тема 5. Многоэлектронные системы.	8	2	2	2			6	2		2
Тема 6. Метод Хартри-Фока	12	3	4			2	9	3		3
Тема 7. Метод Хартри-Фока-Рутана	7	3	2				5	2		2
Тема 8. Энергия электронной корреляции	11	4	4				8	3		3
Тема 9. Распределение электронной плотности молекулы	8	4	2				6	2		2

Тема 10. Метод функционала плотности	8	4	2				6	2		2
Тема 11. Полуэмпирические методы квантовой химии	13	4	4	2			10	3		3
Тема 12. Реакционная способность молекул	15	4	6			2	12	3		3
Промежуточная аттестация <u>экзамен</u>	36					4				32
Итого	144	36	36	4		8	84	28		60

6. Образовательные технологии:

- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

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

Учебники и монографии, освещающие отдельные разделы курса; методические разработки, посвященные описанию квантово-химических программных пакетов, структуре входных данных и выходных файлов, а также подходов, применяемых при решении различных задач, таких как поиск оптимальной конфигурации молекулы, анализ ее электронного строения, определение пути химического превращения.

Литература для углубленного изучения:

- 1 Р. Мак-Вини, Б. Сатклиф, "Квантовая механика молекул", Москва: Мир, 1972.
- 2 Дж. Слэтер, "Электронная структура молекул", Москва: Мир, 1965.
- 3 Р. Заградник, Р. Полак. "Основы квантовой химии", Москва: Мир, 1979.
- 4 Л. Цюлик. "Квантовая химия", Москва: Мир, 1976.
- 5 Г. Гельман. "Квантовая химия", Москва: Бином, 2012.

8. Ресурсное обеспечение:

Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу. Со всех компьютеров МГУ организован доступ к полным текстам научных журналов и книг на русском и иностранных языках. Доступ открыт по IP-адресам, логин и пароль не требуются: <http://nbmgu.ru/>

Основная литература

- 1 Н. Ф. Степанов "Квантовая механика и квантовая химия", Москва: Мир, 2001.
- 2 Ю.В. Новаковская. "Молекулярные системы. Теория строения и взаимодействия с излучением", часть I "Общие основы квантовой механики и теории симметрии", Москва: УРСС, 2004.
- 3 Ю.В. Новаковская. "Молекулярные системы. Теория строения и взаимодействия с излучением", часть II "Квантовые состояния молекул", Москва: УРСС, 2004.
- 4 А.Б. Болотин, Н.Ф. Степанов. "Теория групп и ее применения в квантовой механике молекул", Вильнюс: Элком, 1999.
- 5 Н.Ф. Степанов, В.И. Пупышев. "Квантовая механика молекул и квантовая химия", Москва: Изд. МГУ, 1991.
- 6 В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. "Теория строения молекул", Ростов-на-Дону: Феникс, 1997.
7. Ермаков А. И. Квантовая механика и квантовая химия. В 2 частях. Юрайт. 2021.

Дополнительная литература

1. Р. Фларри. "Квантовая химия", Москва: Мир, 1985.
2. С. Фудзинага. "Метод молекулярных орбиталей", Москва: Мир, 1983.
3. И.В. Абаренков, В.Ф. Братцев, А.В. Тулуб. "Начала квантовой химии", Москва: Высшая школа, 1989.
4. И. Майер. "Избранные главы квантовой химии". Москва: Бином, 2006.
5. Б.Я. Симкин, М.Е. Клецкий, М.Н. Глуховцев. "Задачи по теории строения молекул", Ростов-на-Дону: Феникс, 1997.

Материально-техническое обеспечение – лекционная аудитория (поточная) с техникой для презентация материала

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели:

НОВАКОВСКАЯ ЮЛИЯ ВАДИМОВНА, доктор физико-математических наук, профессор кафедры физической химии МГУ,
jnovakovskaya@gmail.com

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.2.

Вопросы к коллоквиуму

Выделение электронной и ядерной задач. Электронный гамильтониан и электронные волновые функции. Система связанных уравнений, определяющих ядерные функции. Адиабатическое приближение и приближение Борна–Оппенгеймера: условия применимости. Поверхность потенциальной энергии.

Построение приближенных решений электронного волнового уравнения. Одноэлектронное приближение. Определитель Слейтера. Правила Слейтера для матричных элементов одно- и двухчастичных операторов. Электронная энергия в состоянии, аппроксимируемом одним определителем.

Метод Хартри-Фока. Оператор Фока, кулоновские и обменные операторы. Уравнения, определяющие орбитали. Канонические уравнения Хартри-Фока и канонические орбитали. Орбитальные энергии и их связь с полной энергией. Принцип заполнения. Вертикальные оценки сродства молекулы к электрону и потенциала ионизации. Ограниченный и неограниченный варианты метода Хартри-Фока. Уравнения Хартри-Фока для пространственных орбиталей.

Приближение МО ЛКАО. Метод Хартри-Фока-Рутана (самосогласованного поля, ССП). Основные уравнения. Представление о схеме ССП. Выбор начального приближения. Базисы атомных орбиталей: функции слейтера и гауссова типа; сжатие наборов функций.

Электронная плотность молекулы. Разложение плотности по произведениям атомных орбиталей. Матрица плотности $\mathbf{R} = \mathbf{CnC}^+$. Анализ распределения электронной плотности в терминах атомных заселенностей и зарядов: представление о схеме Малликена и методе Бейдера.

Недостатки однодетерминантного подхода и корреляция электронов. Учет энергии электронной корреляции. Метод конфигурационного взаимодействия (КВ). Теорема Бриллюэна. Варианты метода КВ: КВ1, КВ1+2 и полное КВ. Представление о многоконфигурационном методе самосогласованного поля.

Основы метода функционала плотности. Теорема Хоэнберга–Кона и функционал энергии. Подход Кона–Шэма. Обменно-корреляционная энергия. Оператор Кона–Шэма. Обменно--корреляционные функционалы.

Варианты контрольных работ

Контрольная работа 1

- Используя атомную систему единиц, запишите полный гамильтониан \mathbf{H} и электронный гамильтониан \mathbf{H}_e для предложенных атомной и молекулярной систем.
- Укажите сходство и различия операторов, входящих в ядерный гамильтониан в адиабатическом приближении и в приближении Борна--Оппенгеймера, для двух предложенных частиц.
- Запишите определитель Слейтера для заданной электронной конфигурации, указав нормировочный множитель и все составляющие элементы:

Контрольная работа 2

- Определите возможные спиновые состояния предложенной частицы. Выбрав электронную конфигурацию, отвечающую состоянию с наименьшей мультиплетностью, запишите оператор Фока, собственными функциями которого будут соответствующие

щие спин-орбитали. Определите число занятых и вакантных молекулярных орбиталей, которые будут найдены при решении задачи методом Хартри-Фока с использованием минимального базисного набора.

- Для предложенной модельной сопряженной системы составьте матрицу эффективного гамильтониана \mathbf{H} в приближении Хюккеля. Используя известные решения соответствующей задачи (энергии молекулярных орбиталей и коэффициенты их разложения по базису), оцените энергию делокализации; оцените жесткость системы и охарактеризуйте ее реакционную способность; оцените заряды на атомах и порядки связей; предскажите предпочтительные направления присоединения нуклеофила и электрофила (если это возможно); обоснуйте предсказания.

Вопросы для подготовки к экзамену:

1. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение и приближение Борна-Оппенгеймера.
2. Решение молекулярной задачи в адиабатическом приближении. Электронные и ядерные функции.
3. Пространственная и перестановочная симметрия ядерной конфигурации и электронного гамильтониана. Локальная симметрия поверхности потенциальной энергии.
4. Вырожденные электронные состояния молекулярных систем. Снятие вырождения при понижении симметрии системы.
5. Одноэлектронное приближение. Определитель Слейтера. Правила Слейтера для матричных элементов одно- и двухчастичных операторов.
6. Электронная энергия в однодетерминантном приближении: ее составляющие.
7. Электронная плотность. Разложение плотности по произведениям атомных орбиталей. Матрица плотности.
8. Анализ распределения электронной плотности в терминах атомных заселенностей и зарядов. Представление о схеме Маллика и методе Бейдера.
9. Недостатки однодетерминантного подхода. Энергия электронной корреляции.
10. Индексы реакционной способности: электроотрицательность и жесткость атомов и молекул. Глобальная и локальная мягкость молекул.
11. Качественное представление о реакционной способности. Электронные функции Фукуи. Оценка электрофильности и нуклеофильности молекулы и ее фрагментов.
12. Качественное представление о реакционной способности. Принцип сохранения орбитальной симметрии и правила Вудворда-Хоффмана.
13. Метод Хартри-Фока. Оператор Фока, кулоновские и обменные операторы. Уравнения, определяющие орбитали. Канонические уравнения Хартри-Фока и канонические орбитали.
14. Метод Хартри-Фока. Орбитальные энергии и их связь с полной энергией. Принцип заполнения.
15. Метод Хартри-Фока. Вертикальные оценки сродства молекулы к электрону и потенциала ионизации.
16. Ограниченный и неограниченный варианты метода Хартри-Фока. Уравнения Хартри-Фока для пространственных орбиталей.
17. Приближение МО ЛКАО. Метод Хартри-Фока-Рутана. Основные уравнения. Схема самосогласования решения.
18. Приближение МО ЛКАО. Базисы атомных орбиталей.

19. Учет энергии электронной корреляции: метод конфигурационного взаимодействия. Теорема Бриллюэна.
 20. Учет энергии электронной корреляции: представление о теории возмущений Меллера–Плессета.
 21. Основы метода функционала плотности. Теорема Хоэнберга–Кона и функционал энергии.
 22. Основы метода функционала плотности. Оператор Кона-Шэма. Обменно-корреляционные функционалы.
 23. Полуэмпирические методы квантовой химии. Приближение нулевого дифференциального перекрытия и валентное приближение.
 24. Полуэмпирические методы. σ -электронное приближение и простой метод Хюккеля. Энергия делокализации.

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 непринципального 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: условия выделения уравнений, определяющих стационарные состояния электронной и ядерной подсистем молекул; основы одноэлектронного приближения, его ограничения и недостатки и способы уточнения описания электронного состояния молекул; способы получения данных, характеризующих устойчивость, особенности электронного строения и реакционную способность молекул Знать: требования к оформлению и представлению результатов квантово-химических исследований Знать: способы аналитического описания свойств молекулярных систем	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене

<p>Знать: основные базы данных структурного и энергетического профиля Знать: требования к оформлению и представлению результатов работ в области квантовой химии</p>	
<p>Уметь: находить необходимые для работы сведения в открытых источниках информации Уметь: сопоставлять информацию из разных источников, оценивать ее достоверность Уметь: формулировать научные гипотезы при обсуждении литературных и собственных данных Уметь: выбирать коммуникативно приемлемый стиль делового общения, использовать необходимые языковые средства, тактики и стратегии для решения коммуникативных задач в академической и профессиональной сферах Уметь: работать с учебными и научными текстами разного уровня сложности, отвечающими задачам профессиональной деятельности Уметь: использовать программные средства удаленного коллективного доступа для решения задач научной деятельности Уметь: пользоваться программными средствами, автоматизирующими обработку данных (управление базами данных, статистическая обработка, визуализация и т.п.) Уметь: формулировать и решать конкретные задачи на основе подходов, освоенных в курсе квантовой химии Уметь: получать структурно-энергетические данные для конкретных молекул, проводить их математическую обработку Уметь: проводить математическую обработку структурно-энергетических данных, обобщать полученные результаты Уметь: выбирать адекватные квантово-химические методы решения задач электронного строения молекул Уметь: использовать современные аналитические методы оценки реакционной способности молекул и энергий химических превращений Уметь: оценить корректность результатов квантово-химических расчетов Уметь: использовать физические законы и представления при интерпретации результатов квантово-химического моделирования Уметь: корректно составлять поисковый запрос информации структурно-энергетического содержания</p>	<p>Мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене</p>
<p>Владеть: навыками обмена профессиональной информацией с учетом основных требований информационной безопасности Владеть: навыками работы с современными программными пакетами для решения задач в области квантовой химии Владеть: навыками оформления протоколов результатов оценки структурно-энергетических свойств молекул Владеть: навыками работы с профессиональными базами данных структурно-энергетического профиля</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене</p>

