

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(государственный университет)»



«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по учебной работе
и экономическому развитию

Д.А. Зубцов

Рабочая программа дисциплины (модуля)
Строение молекул и квантовая химия

по дисциплине:
по направлению:
профиль подготовки:

Прикладные математика и физика (бакалавриат)
Химическая физика и свойства наноструктур
Факультет молекулярной и химической физики
кафедра физики супрамолекулярных систем и нанофотоники

курс: 4
квалификация: бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 7(Осенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

практические и семинарские занятия: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 42 час.

Всего часов: 72, всего зач. ед.: 2

Количество курсовых работ, заданий: 1

Программу составил: С.О. Адамсон, канд. хим. наук, доцент

Программа обсуждена на заседании кафедры

4 февраля 2016 г.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий кафедрой

М.В. Алфимов

Начальник учебного управления

И.Р. Гарайшина

Декан факультета

В.М. Некипелов

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

Целью дисциплины является изучение теоретических основ квантово-химических методов и формирование готовности их применения в профессиональной деятельности.

Задачи дисциплины

- формирование базовых знаний в области современной квантовой химии как дисциплины, являющейся источником данных, необходимых для решения широкого круга задач в области молекулярной и биологической физики;
- приобретение начальных навыков применения пакетов квантово-химических программ;
- формирование способности анализировать полученные результаты, делать выводы об оптимальности применения тех или иных методов квантовой химии;
- приобретение знаний, необходимых для использования научной периодической литературы в области квантовой химии;
- оказание помощи студентам в проведении собственных теоретических и экспериментальных исследований, требующих применения методов квантовой химии.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

В курсе излагаются теоретические основы современных методов квантовой химии и элементов молекулярной спектроскопии. Для освоения данной дисциплины обучающийся должен обладать знаниями и умениями в объеме курса высшей математики, а именно:

- владеть символьным языком алгебры, приёмами выполнения тождественных преобразований рациональных выражений, решения уравнений, систем уравнений, неравенств;
- умение применять алгебраические преобразования, аппарат уравнений и неравенств для решения задач;
- понимать сущность алгоритмических предписаний и умение действовать в соответствии с предложенным алгоритмом;
- владеть системой функциональных понятий, функциональным языком и символикой.

Данная дисциплина относится к вариативной части образовательной программы.

Дисциплина «Строение молекул и квантовая химия» базируется на дисциплинах:

- Общая и неорганическая химия;
- Органическая химия;
- Дифференциальные уравнения;
- Линейная алгебра;
- Математический анализ.

Дисциплина «Строение молекул и квантовая химия» предшествует изучению дисциплин:

- Научно-исследовательская работа.

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

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих общекультурных, общепрофессиональных и профессиональных компетенций:

- способность понимать ключевые аспекты и концепции в области их специализации (ОПК-3);
- способность применять теорию и методы математики для построения качественных и количественных моделей объектов и процессов в естественнонаучной сфере деятельности (ОПК-2).

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- основные методы приближенного решения молекулярного и электронного уравнений Шредингера;
- особенности применения неэмпирических, полуэмпирических и эмпирических методов решения электронного уравнения, непосредственно следующие из их теоретического аппарата;
- основы теории групп и ее применения к решению задач квантовой химии, молекулярной и биологической физики;
- особенности моделей, применяемых для интерпретации молекулярных спектров и расчета термодинамических параметров молекул.

уметь:

- применять полученные знания для решения прикладных задач, требующих извлечения данных о молекулярной структуре и свойствах из научной (периодической) литературы.

владеть:

- начальными навыками применения пакетов квантово-химических программ, способностью анализировать полученные результаты, делать выводы об оптимальности применения тех или иных методов квантовой химии.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу				
		Лекции	Практические и семинарские занятия	Лаборат. работы	Задания, курсовые работы	Самост. работа
1	Введение	2				4
2	Молекулярное уравнение Шредингера	2				2
3	Симметрия молекулярных систем и твердых тел	2				2
4	Электронное уравнение Шредингера для молекулы	2				6
5	Неэмпирические методы решения электронного уравнения Шредингера	6				8
6	Полуэмпирические и эмпирические методы решения электронного уравнения Шредингера	4				8
7	Поступательное, вращательное и колебательное движение ядер молекулы	2				2
8	Вращательные состояния молекулы	2				2
9	Колебательные состояния молекулы	2				2
10	Переходы между состояниями молекулы под воздействием электромагнитного излучения	2				1
11	Электрические и магнитные свойства молекул	2				1

12	Многомасштабное моделирование	2			4
Итого часов		30			42
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		72 час., 2 зач.ед.			

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 7 (Осенний)

1. Введение

Предмет «Квантовая химия и строение молекул». Основная и дополнительная литература. Постулаты квантовой механики. Гамильтониан молекулы в отсутствие внешних взаимодействий.

2. Молекулярное уравнение Шредингера

Разделение электронного и ядерного движения. Приближение Борна-Оппенгеймера. Адиабатическое приближение. Поверхности потенциальной энергии. Равновесные геометрические параметры молекулы. Энергия диссоциации. Учет неадиабатических взаимодействий. Адиабатические состояния. Методы приближенного решения уравнения Шредингера. Вариационный метод. Основное уравнение вариационного метода. Метод Ритца. Принцип Бубнова-Галеркина. Проекционный метод. Теория возмущений Рэлея-Шредингера.

3. Симметрия молекулярных систем и твердых тел

Элементы симметрии. Коммутация электронного гамильтониана и элементов симметрии. Точечные группы симметрии. Классификация точечных групп симметрии. Прямое произведение групп. Групповые таблицы умножения (таблицы Кэли). Представления точечных групп. Прямое произведение представлений. Характеры представлений групп. Приводимые и неприводимые представления. Леммы Шура. Большая и малая теоремы ортогональности Вигнера. Таблицы характеров неприводимых представлений. Примеры построения таблиц характеров прямым методом и методом прямого произведения групп. Редукция приводимых представлений. Классификация собственных функций электронного гамильтониана по неприводимым представлениям точечных групп. Проекторы на неприводимые представления группы. Ограничения на величину матричных элементов. Решение типовых задач. Примеры редукции приводимых представлений. Полный и неполный проекторы. Правила отбора для матричных элементов различных операторов. Теория кристаллического поля и теория поля лигандов.

4. Электронное уравнение Шредингера для молекулы

Общие требования к электронной волновой функции. Антисимметрия электронной волновой функции. Собственность волновой функции по спину. Теорема Като и cusp -условие. Определитель (детерминант) Слейтера. Спин-орбиталь. Понятие о замкнутых и открытых оболочках. Конфигурационная функция состояния. Антисимметризатор Слейтера. Выражения для матричных элементов между детерминантами Слейтера. Метод Хартри-Фока. Функционал энергии в методе Хартри-Фока. Множители Лагранжа. Варьирование однодетерминантной функции. Уравнения Хартри-Фока. Теорема Бриллюэна. Теорема Купманса. Приближение МО ЛКАО. Уравнения Хартри-Фока-Рутаана. Базисы для решения электронного уравнения методом Хартри-Фока-Рутаана.

5. Неэмпирические методы решения электронного уравнения Шредингера

Энергия электронной корреляции. Общая классификация неэмпирических методов решения электронного уравнения Шредингера. Размерная согласованность. Метод взаимодействия конфигураций (КВ). Приближение полного КВ. Методы КВ1 (метод Тамма-Данкова) и КВ2. Метод КВ с набором исходных конфигураций. Выбор оптимального базиса спин-орбиталей. Начальные представления о многоконфигурационных методах самосогласованного поля - МК ССП и МК ХФ.

Вторичное квантование. Кластерное разложение волновой функции. Методы CEPA, CCSD, CISD, QCI. T1 – критерий и его аналоги. Подходы на основе теории возмущений. Теория возмущений Меллера-Плессета. Гибридные методы (AQCC, ACPF, DDCI). Одноконфигурационные и многоконфигурационные неэмпирические методы. Особенности практического применения неэмпирических методов. Пакеты программ GAMESS, Gaussian, MolPro, MOLCAS.

6. Полуэмпирические и эмпирические методы решения электронного уравнения Шредингера

Приближение функционала плотности. Теоремы Хоэнберга-Кона. N и V – представимость. Уравнения Кона-Шэма. Параметризация функционалов плотности. Гибридные функционалы. Полуэмпирические методы решения электронного уравнения Шредингера. Методы, основанные на пренебрежении дифференциальным перекрытием атомных орбиталей. Пакет программ MOPACK. π -электронное приближение. Простой и расширенный методы Хюккеля. Классическая теория химического строения. Эффективные атомы, валентность, химические связи, формулы строения. Связь строения молекул и свойств вещества в классической теории. Аддитивные схемы расчета термодинамических параметров молекул. Метод самосогласованного силового поля. Нестационарные приближения Хартри-Фока и функционала плотности. Вариационный принцип Френкеля. Теорема Рунге-Гросса. Методы TD HF и TD DFT.

7. Поступательное, вращательное и колебательное движение ядер молекулы

Классическая задача о движении ядер молекулы. Интерпретация результатов. Возможность разделения группового движения ядер на поступательное, вращательное и колебательное. Молекулярная система координат. Гамильтониан, описывающий движение ядер молекулы. Условия Экарта-Казимира.

8. Вращательные состояния молекулы

Вращательные состояния молекул. Различные типы волчков (ротаторов). Структура вращательного спектра наиболее типичных многоатомных молекул.

9. Колебательные состояния молекулы

Колебательное движение ядер молекулы. Теория малых колебаний. Гармоническое приближение. Нормальные колебания. Использование теории групп для нахождения нормальных колебаний. Координаты симметрии. Локальные колебания. Электронно-колебательное взаимодействие. Эффект Яна-Теллера.

10. Переходы между состояниями молекулы под воздействием электромагнитного излучения

Временная теория возмущений. Матричные элементы операторов перехода. Дипольное приближение. Электронно-колебательно-вращательные спектры молекул. Принцип Франка-Кондона. Правила отбора в молекулярных спектрах. Использование колебательно-вращательных спектров для выяснения структуры молекул. Использование одноэлектронной модели для описания фотоэлектронных, рентгенэлектронных и оже-электронных спектров молекул.

11. Электрические и магнитные свойства молекул

Дипольный момент и поляризуемость молекулы. Квадрупольный момент молекулы. Экспериментальное определение дипольного момента и поляризуемости. Магнитный момент и магнитная восприимчивость молекул. Орбитальная и спиновая составляющие магнитного момента. Спин-спиновое взаимодействие электронов и ядер. Спектры ЭПР и ЯМР.

12. Многомасштабное моделирование

Учет эффектов среды. Гибридные методы расчета структуры и свойств больших молекул (QM/MM). Многомасштабное моделирование.

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Учебная аудитория, оснащенная доской и мультимедийным оборудованием (проектор).

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

Основная литература

1. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Бинوم, 2010, -496 с.
2. Барановский В. Квантовая механика и квантовая химия. Academia, 2008, -384с.
3. Дементьев А.И., Адамсон С.О. Строение молекул и квантовая химия. Москва, из-во МФТИ, 2008, 250 с.

Дополнительная литература

1. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Ростов-на-Дону, «Феникс», 1997, -558 с.
2. Фудзинага С., Метод молекулярных орбит, Москва, Мир, 1983, -461 с.
3. Степанов Н.Ф., Пупышев В.И. Квантовая механика молекул и квантовая химия. Москва, из-во МГУ, 1991, -379 с.
4. Эллиот Дж., Добер П., Симметрия в физике, Москва, Мир, 1983, -Т.1-368с.,-Т.2-416с.
5. Флайгер У. Строение и динамика молекул. Москва, из-во «Мир», 1982 тт.1-2.
6. Р. Фларри, Группы симметрии. Теория и химические приложения. Москва, Мир, 1983 -400с.

7. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

1. Симкин Б.Я., Клецкий М.Е., Глуховцев М.Н. Задачи по теории строения молекул. Ростов-на-Дону, «Феникс», 1997, -272 с.
2. Бутырская Е. Компьютерная химия. Основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView. Солон-Пресс, 2011, -224с.
3. И. Харгиттаи, М. Харгиттаи. Симметрия глазами химика. Москва. Мир, 1989 -494с.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

1. Химический портал - <http://www.webqc.org>
2. Официальный портал Национального института стандартов США – www.nist.gov
3. Элементы: Популярный сайт о фундаментальной науке. Новости науки. Календарь конференций: www.elementy.ru

9. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

В процессе самостоятельной работы обучающихся для решения систем линейных и нелинейных уравнений, задач на собственные значения возможно использование таких программных средств, как Mathcad, Mathematica и др.

10. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Студент, прослушавший курс, должен с одной стороны, овладеть теоретическим аппаратом квантовой химии, а с другой стороны, должен научиться применять полученные знания на практике. Успешное освоение курса требует самостоятельной работы студента. В программе курса для самостоятельной работы студента над темой отводится минимальное время.

Самостоятельная работа включает в себя:

- проработку учебного материала (по конспектам лекций, учебной и научной литературе),
- чтение и конспектирование дополнительной литературы,
- подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения,
- решение задач, предлагаемых студентам на лекциях,
- подготовку к зачёту.

Руководство и контроль самостоятельной работы студента осуществляется в форме индивидуальных консультаций. Показателем владения материалом служит умение решать задачи. Для формирования умения применять теоретические знания на практике студенту необходимо решать как можно больше задач. При решении задач каждое действие необходимо аргументировать, ссылаясь на рассмотренный ранее теоретический аппарат.

Обычно придерживаются следующей схемы: изучение материала лекции по конспекту в тот же день, когда была прослушана лекция (10-15 минут); повторение материала накануне следующей лекции (10-15 минут), проработка учебного материала по конспектам лекций, учебной и научной литературе, подготовка ответов на вопросы, решение задач (1 час).

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к лектору. Обязательным требованием является выполнение домашних работ, которые систематически сдаются на проверку.

11. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации по итогам обучения

Приложение

**ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ
ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

по направлению: Прикладные математика и физика (бакалавриат)
профиль подготовки: Химическая физика и свойства наноструктур
Факультет молекулярной и химической физики
кафедра физики супрамолекулярных систем и нано
курс: 4
квалификация: бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 7(Осенний) - Дифференцированный зачет

Разработчик: С.О. Адамсон, канд. хим. наук, доцент

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Освоение дисциплины направлено на формирование у обучающегося следующих общекультурных (ОК), общепрофессиональных (ОПК) и профессиональных (ПК) компетенций:

способность понимать ключевые аспекты и концепции в области их специализации (ОПК-3);
способность применять теорию и методы математики для построения качественных и количественных моделей объектов и процессов в естественнонаучной сфере деятельности (ОПК-2).

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Строение молекул и квантовая химия» обучающийся должен:

знать:

- основные методы приближенного решения молекулярного и электронного уравнений Шредингера;
- особенности применения неэмпирических, полуэмпирических и эмпирических методов решения электронного уравнения, непосредственно следующие из их теоретического аппарата;
- основы теории групп и ее применения к решению задач квантовой химии, молекулярной и биологической физики;
- особенности моделей, применяемых для интерпретации молекулярных спектров и расчета термодинамических параметров молекул.

уметь:

- применять полученные знания для решения прикладных задач, требующих извлечения данных о молекулярной структуре и свойствах из научной (периодической) литературы.

владеть:

- начальными навыками применения пакетов квантово-химических программ, способностью анализировать полученные результаты, делать выводы об оптимальности применения тех или иных методов квантовой химии.

3. Перечень типовых контрольных заданий, используемых для оценки знаний, умений, навыков

Контрольные вопросы к дифференцированному зачету:

1. Молекулярный гамильтониан и разделение электронного и ядерного движения.
2. Неадиабатические взаимодействия и способы их учета.
3. Вариационный метод решения стационарного уравнения Шредингера.
4. Применение теории возмущений для решения стационарного уравнения Шредингера.
5. Принцип Бубнова-Галеркина.
6. Поверхности потенциальной энергии многоатомной молекулы.
7. Выражения для матричных элементов между детерминантами Слейтера.
8. Классификация групп симметрии (точечных групп симметрии).
9. Дать формулировки большой и малой теорем Вигнера.
10. Ввести выражения для проекторов на неприводимые представления групп симметрии.
11. Метод Хартри-Фока-Рутаана (приближение МО ЛКАО).
12. Выбор систем базисных функций в неэмпирических методах.
13. Теория функционала плотности. Теоремы Хоэнберга-Кона и уравнения Кона-Шэма.
14. Сформулируйте понятие о корреляционной энергии.

15. Полуэмпирические методы расчета электронной структуры молекул.

16. Методы учета электронной корреляции.

4. Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 балла - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

При проведении устного дифференцированного зачета обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося по билету на устном дифференцированном зачете не должен превышать одного астрономического часа.