

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

**УТВЕРЖДЕНО**

**Директор физтех-школы  
электроники, фотоники и  
молекулярной физики  
А.С. Батурин**

	<b>Рабочая программа дисциплины (модуля)</b>
<b>по дисциплине:</b>	Практикум по квантово-химическим расчетам в термодинамике
<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики высокотемпературных процессов
<b>курс:</b>	1
<b>квалификация:</b>	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 2 (весенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 60 час.

Всего часов: 90, всего зач. ед.: 2

Программу составил: М.А. Мальцев, канд. физ.-мат. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры физики высокотемпературных процессов 10.01.2025

## Аннотация

Курс "Практикум по квантово-химическим расчетам в термодинамике" предусматривает изучение основных принципов квантовой химии и их применения для определения термодинамических свойств молекулярных систем. Предметом является изучение теоретических основ, методов и практического применения квантово-химических расчетов для анализа термодинамических свойств молекул и химических процессов.

### 1. Цели и задачи

#### Цель дисциплины

- освоение методов квантовой химии для вычисления и анализа термодинамических свойств молекулярных систем, моделирования химических реакций и оценки энергетических параметров с использованием современных вычислительных подходов.

#### Задачи дисциплины

- изучение теоретических основ квантовой химии и термодинамики для понимания молекулярных процессов и их энергетических характеристик.
- овладение практическими навыками использования современных программных средств для квантово-химического моделирования и расчета термодинамических параметров.
- выработка навыков применения квантово-химических методов для анализа химических реакций, прогнозирования влияния внешних условий на термодинамические свойства систем

### 2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ)	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)
	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области

ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)

### 3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- основные принципы квантовой химии, включая методы расчета молекулярной структуры, энергии и свойств;
- методы вычисления термодинамических параметров, таких как энтальпия, энтропия и энергия Гиббса, на основе квантово-химических данных;
- принципы статистической термодинамики и их связь с квантово-химическими расчетами для прогнозирования свойств молекул и химических реакций.

уметь:

- проводить квантово-химические расчеты с использованием современных программных комплексов и интерпретировать полученные результаты;
- рассчитывать термодинамические параметры молекул и химических реакций, включая свободную энергию, энтальпию и энтропию, с учетом влияния внешних факторов;
- применять вычислительные методы для моделирования химических процессов, прогнозирования устойчивости молекул и оценки равновесий реакций.

владеть:

- навыками работы с квантово-химическими программными комплексами для моделирования молекул и анализа их свойств;
- техниками расчета и интерпретации термодинамических характеристик молекулярных систем и химических процессов;
- методами прогнозирования и анализа химических реакций на основе квантово-химических данных и термодинамических закономерностей.

### 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	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Введение в квантовую химию. Основные концепции, постулаты квантовой механики и их применение в химии.	2			4
2	Программные средства для квантово-химических расчетов. Обзор и работа с ПО (Gaussian, ORCA, GAMESS и др.).	2			4

3	Молекулярные орбитали и теории связи. Теория Хартри-Фока, метод молекулярных орбиталей (МО), основные приближения	2			4
4	Методы квантово-химических расчетов. Теория функционала плотности (DFT), пост-HF методы, выбор базисных наборов.	2			4
5	Электронные свойства молекул. Расчет энергии, дипольного момента и поляризуемости	2			4
6	Взаимодействие молекул с внешними полями. Влияние электрических и магнитных полей на молекулы	2			4
7	Основы термодинамики молекулярных систем. Энергия, энтропия, энтальпия, свободная энергия	2			4
8	Статистическая термодинамика. Распределение Больцмана, молекулярное описание макроскопических свойств	2			4
9	Расчеты термодинамических свойств. Тепловые емкости, константы равновесия, фазовые переходы	2			4
10	Моделирование химических реакций. Вычисление энергетических барьеров, исследование реакционных механизмов	2			4
11	Влияние растворителя на реакции. Моделирование среды и ее влияние на термодинамические параметры.	2			4
12	Анализ вибрационных и вращательных спектров. Расчет колебательных частот и их связь с термодинамическими величинами	2			4
13	Термодинамика каталитических процессов. Моделирование катализаторов и реакций на их основе	2			4
14	Компьютерное моделирование многокомпонентных систем. Основы моделирования систем с несколькими молекулами, включая межмолекулярные взаимодействия и их влияние на термодинамические свойства.	2			4
15	Интерпретация и визуализация результатов расчетов. Анализ данных, построение энергетических профилей, визуализация орбиталей	2			4
Итого часов		30			60
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		90 час., 2 зач.ед.			

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

Семестр: 2 (Весенний)

1. Введение в квантовую химию. Основные концепции, постулаты квантовой механики и их применение в химии.

Введение в квантовую химию. Основные постулаты квантовой механики и их значение для описания микроскопических систем. Уравнение Шрёдингера. Постановка задачи, аналитические и численные методы решения. Примеры применения квантовой механики в химии: частица в ящике, гармонический осциллятор, атом водорода.

2. Программные средства для квантово-химических расчетов. Обзор и работа с ПО (Gaussian, ORCA, GAMESS и др.).

Программные средства для квантово-химических расчетов. Краткий обзор возможностей программных пакетов для квантово-химических расчетов (Gaussian, ORCA, GAMESS, Psi4). Процесс установки и настройки программного обеспечения для выполнения расчетов. Подготовка входных файлов: синтаксис, структура, ключевые параметры. Построение молекулярных геометрий и предварительная оптимизация структуры.

3. Молекулярные орбитали и теории связи. Теория Хартри-Фока, метод молекулярных орбиталей (МО), основные приближения

Молекулярные орбитали и теории связи. Понятие молекулярных орбиталей: сигма-, пи- и дельта-орбитали. Основы теории Хартри-Фока: приближение одноэлектронных функций. Метод молекулярных орбиталей (МО): линейная комбинация атомных орбиталей (ЛКАО). Применение метода МО для анализа химических связей в простых молекулах.

4. Методы квантово-химических расчетов. Теория функционала плотности (DFT), пост-HF методы, выбор базисных наборов.

Методы квантово-химических расчетов. Теория функционала плотности (DFT): принципы, функционалы, области применения. Пост-HF методы (MP2, CCSD, MCSCF): их преимущества и ограничения. Выбор базисных наборов: минимальные, расширенные, поляризуемые и диффузные базисы. Комбинированное использование различных методов для повышения точности расчетов.

5. Электронные свойства молекул. Расчет энергии, дипольного момента и поляризуемости

Электронные свойства молекул. Определение энергии основного состояния молекулы. Расчет и интерпретация дипольного момента молекул. Поляризуемость: теоретические подходы к расчету и ее практическое значение. Анализ электронных свойств на основе полученных результатов.

6. Взаимодействие молекул с внешними полями. Влияние электрических и магнитных полей на молекулы

Взаимодействие молекул с внешними полями. Изменение энергетического состояния молекулы под действием электрического поля. Влияние магнитных полей на молекулярные орбитали и электронную структуру. Моделирование взаимодействия молекул с полями для понимания их поведения в сложных средах.

7. Основы термодинамики молекулярных систем. Энергия, энтропия, энтальпия, свободная энергия

Основы термодинамики молекулярных систем. Квантово-химический расчет внутренней энергии молекул. Определение энтропии и ее связь с микроскопическим описанием молекул. Энтальпия и свободная энергия: способы расчета и их интерпретация.

8. Статистическая термодинамика. Распределение Больцмана, молекулярное описание макроскопических свойств

Статистическая термодинамика. Формула распределения Больцмана и ее использование для описания молекулярных систем. Определение основных макроскопических свойств через распределение по энергетическим состояниям. Применение статистической термодинамики для анализа поведения молекул при различных температурах.

9. Расчеты термодинамических свойств. Тепловые емкости, константы равновесия, фазовые переходы

Расчеты термодинамических свойств. Расчет тепловых емкостей молекул и их температурной зависимости. Вычисление констант равновесия химических реакций с учетом энергетических данных. Моделирование фазовых переходов на молекулярном уровне.

10. Моделирование химических реакций. Вычисление энергетических барьеров, исследование реакционных механизмов

Моделирование химических реакций. Исследование переходных состояний химических реакций. Определение активационных барьеров реакций и их зависимости от условий. Построение энергетических профилей реакций и их интерпретация.

11. Влияние растворителя на реакции. Моделирование среды и ее влияние на термодинамические параметры.

Влияние растворителя на реакции. Использование моделей растворителей (PCM, COSMO) для учета среды. Расчет изменений энергии реакций в различных растворителях. Оценка влияния растворителя на активационные барьеры и термодинамические параметры.

12. Анализ вибрационных и вращательных спектров. Расчет колебательных частот и их связь с термодинамическими величинами

Анализ вибрационных и вращательных спектров. Расчет колебательных частот молекул и их связь с экспериментальными спектрами. Определение основных вибрационных мод и их характеристик. Применение анализа спектров для оценки термодинамических параметров.

13. Термодинамика каталитических процессов. Моделирование катализаторов и реакций на их основе

Термодинамика каталитических процессов. Моделирование каталитических циклов и их энергетических характеристик. Оценка влияния катализатора на активационные барьеры и скорость реакции. Применение термодинамических данных для оптимизации каталитических процессов.

14. Компьютерное моделирование многокомпонентных систем. Основы моделирования систем с несколькими молекулами, включая межмолекулярные взаимодействия и их влияние на термодинамические свойства.

Компьютерное моделирование многокомпонентных систем. Основы моделирования межмолекулярных взаимодействий. Исследование взаимодействия нескольких молекул в одной системе. Влияние межмолекулярных сил на термодинамические свойства систем.

15. Интерпретация и визуализация результатов расчетов. Анализ данных, построение энергетических профилей, визуализация орбиталей

Интерпретация и визуализация результатов расчетов. Анализ данных квантово-химических расчетов: энергии, геометрии, орбиталей. Построение энергетических профилей и визуализация молекулярных структур. Применение программ для визуализации орбиталей и интерпретации результатов (GaussView, Avogadro).

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

Необходимое оборудование для лекций: учебная аудитория, оснащенная компьютером и мультимедийным оборудованием (проектор, звуковая система).

Обеспечение самостоятельной работы: доступ в сеть Интернет, доступ к рекомендованной литературе.

## **6.Перечень рекомендуемой литературы**

### **Основная литература**

Литература выдается на базовой кафедре:

1. В. Г. Цирельсон Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела : учебное пособие – Москва: Лаборатория знаний. 2017. – 522 с.
2. И. Г. Каплан, И. Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы: учебное пособие –Москва: Лаборатория знаний. 2017. – 397 с.
3. В. И. Барановский Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для студ. Вузов – М.: Академия. 2008. – 382 с.

### **Дополнительная литература**

Литература выдается на базовой кафедре:

1. Грибов, Л. А. Квантовая химия: Учебник / Л.А Грибов, С.П. Муштакова. – М.: «Гардарики», 1999. – 390 с.
2. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия: Учебное пособие для вузов / А. И. Ермаков. – Москва : Юрайт, 2010. – 555 с.

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

Не используются

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

На лекционных занятиях используются мультимедийные технологии, включая демонстрацию презентаций.

## **9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)**

Студент, изучающий дисциплину, должен, с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике.

В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

– посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;

- ведения конспекта занятий;
- выполнение заданий практических семинаров и самостоятельную обработку полученных результатов;
- активной самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.



**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)**

<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики высокотемпературных процессов
<b>курс:</b>	<u>1</u>
<b>квалификация:</b>	магистр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 2 (весенний) - Дифференцированный зачет	
<b>Разработчик:</b>	М.А. Мальцев, канд. физ.-мат. наук

## 1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)
	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов
	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)

## 2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Практикум по квантово-химическим расчетам в термодинамике» обучающийся должен:

### знать:

- основные принципы квантовой химии, включая методы расчета молекулярной структуры, энергии и свойств;
- методы вычисления термодинамических параметров, таких как энтальпия, энтропия и энергия Гиббса, на основе квантово-химических данных;
- принципы статистической термодинамики и их связь с квантово-химическими расчетами для прогнозирования свойств молекул и химических реакций.

### уметь:

- проводить квантово-химические расчеты с использованием современных программных комплексов и интерпретировать полученные результаты;
- рассчитывать термодинамические параметры молекул и химических реакций, включая свободную энергию, энтальпию и энтропию, с учетом влияния внешних факторов;
- применять вычислительные методы для моделирования химических процессов, прогнозирования устойчивости молекул и оценки равновесий реакций.

**владеть:**

- навыками работы с квантово-химическими программными комплексами для моделирования молекул и анализа их свойств;
- техниками расчета и интерпретации термодинамических характеристик молекулярных систем и химических процессов;
- методами прогнозирования и анализа химических реакций на основе квантово-химических данных и термодинамических закономерностей.

**3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю**

В начале каждого занятия проводится краткий опрос по теме предыдущего занятия.

**4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся**

Вопросы к дифференцированному зачету:

1. Основные постулаты квантовой механики и их значение для описания микроскопических систем. Уравнение Шрёдингера. Частица в ящике, гармонический осциллятор, атом водорода.
2. Понятие молекулярных орбиталей: сигма-, пи- и дельта-орбитали.
3. Теория Хартри-Фока. Приближение одноэлектронных функций.
4. Метод молекулярных орбиталей (МО). Линейная комбинация атомных орбиталей (ЛКАО).
5. Теория функционала плотности (DFT). Области применения.
6. Пост-HF методы (MP2, CCSD, MCSCF). Преимущества и ограничения.
7. Выбор базисных наборов. Минимальные, расширенные, поляризуемые и диффузные базисы.
8. Расчет и интерпретация дипольного момента молекул.
9. Взаимодействие молекул с внешними полями. Изменение энергетического состояния молекулы под действием электрического поля.
10. Влияние магнитных полей на молекулярные орбитали и электронную структуру.
11. Квантово-химический расчет внутренней энергии молекул. Определение энтропии и ее связь с микроскопическим описанием молекул.
12. Формула распределения Больцмана и ее использование для описания молекулярных систем.
13. Расчет тепловых емкостей молекул и их температурной зависимости. Вычисление констант равновесия химических реакций с учетом энергетических данных.
14. Исследование переходных состояний химических реакций. Определение активационных барьеров реакций и их зависимости от условий.
15. Влияние растворителя на реакции. Использование моделей растворителей (PCM, COSMO) для учета среды.
16. Анализ вибрационных и вращательных спектров. Расчет колебательных частот молекул и их связь с экспериментальными спектрами.
17. Моделирование каталитических циклов и их энергетических характеристик.
18. Исследование взаимодействия нескольких молекул в одной системе. Влияние межмолекулярных сил на термодинамические свойства систем.
19. Интерпретация и визуализация результатов расчетов. Анализ данных квантово-химических расчетов: энергии, геометрии, орбиталей.

**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**

Промежуточная аттестация проводится в форме устного дифференцированного зачета. При проведении устного дифференцированного зачета обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося не должен превышать одного часа.