

*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Российский университет дружбы народов»*

Факультет физико-математических и естественных наук

Рекомендовано МССН
по направлению 04.00.00 «Химия»

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование дисциплины

ИЗБРАННЫЕ ГЛАВЫ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

Рекомендуется для направления подготовки

04.04.01 «ХИМИЯ»

Направленность программы (профиль)

«ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ»

1. Цели и задачи дисциплины

Основной целью настоящего курса является ознакомление студентов с популярными расчетными методами современной квантовой химии, включающими наиболее точные методы расчета электронной и геометрической структуры молекул, которые используются для получения важной и труднодоступной для эксперимента информации.

Задачи:

- обеспечение понимания студентами теоретических основ для работы с современными квантово-химическими программами GAMESS, GAUSSIAN и некоторыми другими;
- умение сравнивать достоверность результатов расчетов, выполненных в различных приближениях другими авторами;
- использование наиболее корректных результатов исследований для сравнения со своими экспериментальными данными;
- выработка у студентов отношения к получаемым квантово-химическим результатам, как к машинному эксперименту, равноправному по отношению к любым другим экспериментальным методам исследований.

Курс предназначен для обучения студентов в магистратуре по специальности «Фундаментальная и прикладная химия». Является обязательным теоретическим курсом.

2. Место дисциплины в структуре ООП.

Дисциплина «Избранные главы квантовой химии» относится к вариативной части факультативного блока учебного плана.

В таблице № 1 приведены предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций дисциплины в соответствии с матрицей компетенций ОП ВО.

Таблица № 1

Предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций

№ п/п	Шифр и наименование компетенции	Предшествующие дисциплины	Последующие дисциплины
Универсальные компетенции			
УК-6	Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	Актуальные задачи современной химии Кинетика элементарных реакций Статистическая термодинамика Катализ Термодинамика неравновесных процессов Нанохимия Адсорбция Физико-химия поверхности и хемосорбция Химия окружающей среды Современные проблемы менеджмента в химии НИР	Актуальные задачи современной химии Физические методы исследования в катализе Применение хроматографии в катализе НИР Преддипломная практика
УК-7	Способен искать нужные источники информации и данные, воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с		НИР Преддипломная практика

полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач; проводить оценку информации, ее достоверность, строить логические умозаключения на основании поступающих информации и данных		
Профессиональные компетенции		
М-ПК-1-н Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией наук	Кинетика элементарных реакций Статистическая термодинамика Катализ Термодинамика неравновесных процессов Нанохимия Адсорбция Физико-химия поверхности и хемосорбция Химия окружающей среды Современные проблемы менеджмента в химии НИР	Физические методы исследования в катализе Применение хроматографии в катализе НИР Преддипломная практика
М-ПК-2-н Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	Кинетика элементарных реакций Статистическая термодинамика Катализ Термодинамика неравновесных процессов Нанохимия Адсорбция Физико-химия поверхности и хемосорбция Химия окружающей среды Современные проблемы менеджмента в химии НИР	Физические методы исследования в катализе Применение хроматографии в катализе НИР Преддипломная практика

3. Требования к результатам освоения дисциплины:

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

Формируемые компетенции

Компетенции	Название компетенции	Составляющие компетенции
УК-6	Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	УК-6.1. Оценивает свои ресурсы и их пределы (личностные, ситуативные, временные), оптимально их использует для успешного выполнения порученного задания. УК-6.2. Определяет приоритеты профессионального роста и способы совершенствования собственной деятельности на основе самооценки по выбранным критериям; УК-6.3. Выстраивает гибкую профессиональную траекторию, используя инструменты непрерывного образования, с учетом накопленного опыта профессиональной деятельности и динамично изменяющихся требований рынка труда
УК-7	Способен искать нужные источники информации и данные,	УК-7.1. Использует цифровые технологии и методы поиска, обработки, анализа, хранения и представления информации в области химии. УК-7.2. Разрабатывает концепцию цифровых технологий и

	воспринимать, анализировать, запоминать и передавать информацию с использованием цифровых средств, а также с помощью алгоритмов при работе с полученными из различных источников данными с целью эффективного использования полученной информации для решения задач; проводить оценку информации, ее достоверность, строить логические умозаключения на основании поступающих информации и данных	методов поиска, обработки, анализа, хранения и представления информации в рамках обозначенной проблемы: формулирует цель, задачи, обосновывает актуальность, значимость, ожидаемые результаты и возможные сферы их применения в условиях цифровой экономики и современной корпоративной информационной культуры; УК-7.3. Осуществляет мониторинг использования цифровых технологий и методов поиска, обработки, анализа, хранения и представления информации в области химии, корректирует отклонения, вносит дополнительные изменения в план использования цифровых технологий.
М-ПК-1-н	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	М-ПК-1-н-1. Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий, М-ПК-1-н-2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов
М-ПК-2-н	Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	М-ПК-2-н-1. Проводит поиск специализированной информации в патентно-информационных базах данных М-ПК-2-н-2. Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)

В результате изучения дисциплины студент должен овладеть следующими результатами:

Знать:

- основные положения различных областей химии - общей, неорганической, органической и физической химии. А также квантовой механики и математики;
- особенности работы с различными базами данных для получения наиболее достоверных сведений об изучаемых системах, относящихся к различным областям современной химии;
- студент обязан знать основные приближения, позволяющие численно решать уравнение Шредингера: неограниченный и ограниченный методы Хартри-Фока, ограниченный метод Хартри – Фока для открытых оболочек. Знать основные типы базисов, используемых в современных квантово – химических программах. А

также основные методы учета энергии электронной корреляции - метод конфигурационного взаимодействия и его модификации, метод многочастичной теории возмущений, метод функционала плотности. Знать особенности полуэмпирических методов квантовой химии.

Уметь:

- формулировать конкретные химические задачи на основе законов и закономерностей, освоенных в курсе избранных глав квантовой химии;
- выделять наиболее достоверные из них, опираясь на знания, полученные в результате освоения данного курса. Вести литературный поиск в различных базах данных с целью получения наиболее достоверных сведений об изучаемых системах, к какой бы области современной химии они не относились;
- оценивать результаты расчетов геометрической и электронной структуры различных молекулярных систем. Выделять наиболее достоверные из них, опираясь на знания, полученные в результате освоения данного курса. Вести литературный поиск в различных базах данных с целью получения наиболее достоверных сведений об изучаемых системах, к какой бы области современной химии они не относились.

Владеть:

- способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу в области современной квантовой химии, привлекая знания из других основных областей химии – общей, неорганической, органической и физической химии;
- современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов расчетов методами современной квантовой химии, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче такой информации;
- простейшими расчетными методами решения химических задач, навыками поиска решений задач в открытых источниках и применения их при решении практических задач, начальными практическими навыками расчетов по одной из современных квантово-химических программ (GAMESS).

4. Объем дисциплины и виды учебной работы.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы.

Вид учебной работы	Всего часов	Модули			
		5	6		
Аудиторные занятия (всего)	34	18	16		
В том числе:					
<i>Лекции</i>	18	18			
<i>Практические занятия (ПЗ)</i>					
<i>Семинары (С)</i>					
<i>Лабораторные работы (ЛР)</i>	16		16		

Самостоятельная работа (всего)		74	1	2		
Общая трудоемкость	час	108	36	72		
	зач. ед.	3	1	2		

5. Содержание дисциплины

5.1. Содержание разделов дисциплины

№ раздела	Наименование раздела	Содержание раздела
1	Особенности различных подходов в методе Хартри-Фока	Неограниченный и ограниченный методы Хартри-Фока. Ограниченный метод Хартри – Фока для замкнутых оболочек. Неограниченный метод Хартри – Фока. Ограниченный метод Хартри – Фока для открытых оболочек. Операторы проектирования. Теорема Бриллюэна.
2	Базисные функции, использующиеся в современных квантово – химических программах	Слэтеровские базисы. Гауссовские базисы. Минимальные базисы. Расширенные базисы. Валентно-расщепленные базисы. Базисы, содержащие поляризационные функции. Базисы, содержащие диффузные функции.
3	Пост хартри - фоковские методы неэмпирической квантовой химии	Учет энергии электронной корреляции. Метод конфигурационного взаимодействия. Ограничение кратности возбуждений. Ограничение размеров активного пространства. Метод CAS-SCF. Метод связанных кластеров. Метод многочастичной теории возмущений. Теория возмущений Рэлея – Шредингера. Теория возмущений Меллера – Плессета. Метод функционала плотности.
4	Полуэмпирические методы квантовой химии	Приближение нулевого дифференциального перекрытия – НДП. Полное пренебрежение двухцентровым дифференциальным перекрытием – ПДДП. Частичное пренебрежение дифференциальным перекрытием – ЧПДП. Модифицированное частичное пренебрежение дифференциальным перекрытием – МЧПДП. Модифицированное пренебрежение двухатомным перекрытием – МПДП. Методы AM1 и PM3.

5.2. Разделы дисциплин и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Лекц.	Практ. зан.	Лаб. зан.	Семина	СРС	Всего час.
1	Особенности различных подходов в методе Хартри-Фока	2		2		18	22
2	Базисные функции, использующиеся в современных	4		4		18	26

	квантово – химических программах						
3	Пост хартри - фоковские методы неэмпирической квантовой химии	8		6		20	34
4	Полуэмпирические методы квантовой химии	4		4		18	26
	Всего	18		16		74	108

6. Лабораторный практикум

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование лабораторных работ	Трудо емкость (час.)
1.	1.	Особенности различных подходов в методе Хартри-Фока	2
2.	2.	Базисные функции, используемые в современных квантово – химических программах	4
3.	3.	Пост хартри - фоковские методы неэмпирической квантовой химии	6
4.	4.	Полуэмпирические методы квантовой химии	4
	Всего		16

7. Практические занятия (Семинары)

Не предусмотрено.

8. Материально – техническое обеспечение дисциплины

Наименование специальных* помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
ул. Орджоникидзе, д.3, Учебная аудитория (ДК) для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также для самостоятельной работы: ауд.№ ДК6	Комплект специализированной мебели; технические средства: рабочее место обучающегося: моноблоки Lenovo (16), рабочее место преподавателя: компьютер (Монитор АОС 19" и системный блок R-Style, компьютерный стол на одно рабочее место (29), стул (29), доска интерактивная Interwrite Learning 1077, проектор DMS800, имеется выход в интернет	Программа корпоративного лицензирования (Microsoft Subscription) Enrollment for Education Solutions № 86626883 от 01.04.2018 г. (Продлевается каждый год, при этом программе присваивается новый номер).
ул. Орджоникидзе, д.3, Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа, групповых и	Комплект специализированной мебели; технические средства: проектор, экран для проекторов, ноутбук, столы;	Программа корпоративного лицензирования (Microsoft Subscription) Enrollment for Education Solutions № 86626883 от 01.04.2018 г.

индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также для самостоятельной работы: ауд.№ 527	имеется wi-fi	(продлевается ежегодно, программе присваивается новый номер)
---	---------------	--

Все оборудование в лабораториях достаточно современно и соответствует действующим санитарным и противопожарным нормам, а также требованиям техники безопасности при проведении учебных работ.

9. Информационное обеспечение дисциплины

Учебно-научный информационный библиотечный центр РУДН	http://lib.rudn.ru/
ЭБС РУДН	http://lib.rudn.ru/MegaPro/Web
ЭБС "Университетская библиотека ONLINE"	http://www.biblioclub.ru
Телекоммуникационная учебно-информационная система (ТУИС) РУДН	http://esystem.pfur.ru/course/view.php?id=998
Портал фундаментального химического образования России	http://www.chemnet.ru
Научная электронная библиотека eLibrary.ru	http://www.elibrary.ru/defaultx.asp
Химическая энциклопедия	http://www.chemport.ru
ХуМуК: сайт о химии для химиков	www.xumuk.ru
Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы:	www.webofscience.com http://www.scopus.com/

10. Учебно-методическое обеспечение дисциплины:

а) основная литература

Боженко Константин Викторович. Основы квантовой химии. Конспект лекций / К.В. Боженко. М.: Изд-во РУДН, 2010. - 124 с.: ил.

Боженко Константин Викторович. Основы квантовой химии. Конспект лекций: Учебное пособие. Ч. 2 / К.В. Боженко. - Электронные текстовые данные. М.: Изд-во РУДН, 2012. - 67 с.

б) дополнительная литература

Боженко Константин Викторович. Методические указания по изучению курса "Основы квантовой химии": Учебное пособие. Раздел 1: Классическая механика / К.В. Боженко. М.: Изд-во РУДН, 2005. - 22 с.: ил.

Боженко Константин Викторович. Методические указания по изучению курса "Основы квантовой химии": Учебное пособие. Раздел 2: Квантовая механика / К.В. Боженко. М.: Изд-во РУДН, 2005. - 22 с.: ил.

в) базы данных, информационно – справочные и поисковые системы

Учебный портал РУДН, личный кабинет преподавателя Боженко К.В. Научная библиотека РУДН, изданные в РУДН пособия из перечня основной и дополнительной литературы № 7, 4-д – 7-д, и их электронные варианты, находящиеся в личном кабинете преподавателя Боженко К.В.

11. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины.

В течение семестра выполняются домашние задания и контрольные мероприятия в виде тестов и двух коллоквиумов. В конце семестра производится итоговый контроль знаний в виде экзамена.

Самостоятельная работа студента заключается в выполнении заданий и тестов, включенных в модули данного курса.

Примерный перечень вопросов промежуточного и итогового контроля знаний.

I. Особенности различных вариантов метода Хартри-Фока.

1. Неограниченный и ограниченный методы Хартри-Фока.
2. Ограниченный метод Хартри – Фока для замкнутых оболочек.
3. Неограниченный метод Хартри – Фока.
4. Ограниченный метод Хартри – Фока для открытых оболочек.
5. Операторы проектирования. Теорема Бриллюэна.

II. Базисные функции, используемые в современных квантово – химических программах.

6. Базисные функции.
7. Слэтеровские базисы.
8. Гауссовские базисы.
9. Минимальные базисы.
10. Расширенные базисы.
11. Расширенные базисы.
12. Валентно-расщепленные базисы.
13. Базисы, содержащие поляризационные функции.
14. Базисы, содержащие диффузные функции.

III. Учет энергии электронной корреляции.

1. Метод конфигурационного взаимодействия.
2. Ограничение кратности возбуждений в методе конфигурационного взаимодействия.
3. Ограничение размеров активного пространства в методе конфигурационного взаимодействия. Метод CASSCF.
4. Метод связанных кластеров.
5. Метод многочастичной теории возмущений.
6. Теория возмущений Рэлея – Шредингера.
7. Теория возмущений Меллера – Плессета.
8. Метод функционала плотности.

IV. Полуэмпирические методы квантовой химии.

1. Приближение нулевого дифференциального перекрытия – НДП.
1. Полное пренебрежение двухцентровым дифференциальным перекрытием – ПДДП.
2. Частичное пренебрежение дифференциальным перекрытием – ЧПДП.
3. Модифицированное частичное пренебрежение дифференциальным перекрытием – МЧПДП.
4. Модифицированное пренебрежение двухатомным перекрытием – МПДП.
5. Методы AM1 и PM3.

12. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине «Избранные главы квантовой химии»

Материалы для оценки уровня освоения учебного материала дисциплины «Избранные главы квантовой химии» (оценочные материалы), включающие в себя перечень компетенций с указанием этапов их формирования, описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания, типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы, методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций, разработаны в полном объеме и доступны для обучающихся на странице дисциплины в ТУИС РУДН.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ВО РУДН.

Разработчики:

Профессор кафедры физической
и коллоидной химии,
д.х.н., профессор



К.В. БОЖЕНКО

Руководитель программы

Профессор кафедры
органической химии



А.В. Варламов

Заведующий кафедрой
физической и коллоидной химии



А.Г. ЧЕРЕДНИЧЕНКО