

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



УТВЕРЖДАЮ

Проректор
по образовательной деятельности КФУ
Проф. Минзарипов Р.Г.

_____ 20__ г.

Программа дисциплины

Квантовая химия СЗ.Б.9

Специальность: 020201.65 - Фундаментальная и прикладная химия

Специализация: Аналитическая химия

Квалификация выпускника:

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Аминова Р.М. , Балакина М.Ю.

Рецензент(ы):

Салихов К.М.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Евтюгин Г. А.

Протокол заседания кафедры No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Регистрационный No

Казань
2013

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) профессор, д.н. (профессор) Аминова Р.М. Кафедра химической физики Отделение физики, Roza.Aminova@kpfu.ru ; Балакина М.Ю.

1. Цели освоения дисциплины

получение теоретических знаний о современных представлениях квантовой химии, о методах расчета пространственной и электронной структуры молекул, а также приобретение умений и навыков работы с комплексами квантово-химических программ

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел "СЗ.Б.9 Профессиональный" основной образовательной программы 020201.65 Фундаментальная и прикладная химия и относится к базовой (общепрофессиональной) части. Осваивается на 5 курсе, 9 семестр.

относится к циклу СЗ общенаучных дисциплин, его базовой части и опирается на основные разделы общенаучных дисциплин: высшая математика, физика, неорганическая химия

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-12 (профессиональные компетенции)	умеет применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных;
ПК-3 (профессиональные компетенции)	способен использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания в области математики и естественных наук;
ПК-4 (профессиональные компетенции)	использует основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применяет методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования;

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

- основные современные методы квантовой химии (неэмпирические и полуэмпирические методы, теорию функционала плотности),
- иметь представления о приближениях и допущениях, использованных при разработке этих методов,
- иметь представления об ограничениях и возможностях разных методов для моделирования электронной структуры и химических реакций

2. должен уметь:

- определять необходимую информацию для расчета электронной структуры молекул и анализировать данные расчетов;
- ориентироваться в обширной литературе, использующей данные квантово-химических расчетов

3. должен владеть:

навыками:

- квантово-химических расчетов физико-химических характеристик веществ;
- квантово-химического моделирования химических реакций

распоряжаться теоретическими знаниями о современных представлениях квантовой химии, о методах расчета пространственной и электронной структуры молекул, а также приобретение умений и навыков работы с комплексами квантово-химических программ

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных(ые) единиц(ы) 108 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 9 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Принцип суперпозиции состояний	9	1	1	2	0	устный опрос
2.	Тема 2. Квантово-механическое описание молекулы	9	2-3	1	4	0	устный опрос
3.	Тема 3. Метод Хартри-Фока	9	4-5	2	2	0	устный опрос
4.	Тема 4. Учет электронной корреляции	9	6-7	2	4	0	контрольная работа
5.	Тема 5. Основы метода функционала плотности	9	8-9	2	4	0	контрольная работа
6.	Тема 6. Учет влияния среды	9	10-11	2	4	0	устный опрос
7.	Тема 7. Топологический анализ распределения электронной плотности	9	12-13	2	4	0	устный опрос

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
8.	Тема 8. Полуэмпирические методы квантовой химии	9	14-15	2	4	0	контрольная работа
9.	Тема 9. Квантово-химические расчеты физических характеристик	9	16	2	4	0	устный опрос
10.	Тема 10. Применение методов квантовой химии для моделирования органической реакции	9	17-18	2	4	0	устный опрос
.	Тема . Итоговая форма контроля	9		0	0	0	зачет
	Итого			18	36	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Принцип суперпозиции состояний

лекционное занятие (1 часа(ов)):

Принцип суперпозиции состояний. Принцип неопределенности. Линейные операторы. Собственные векторы и собственные значения эрмитова оператора. Существование волновой функции, измеряемые величины, средние значения физических величин.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Уравнение Шредингера: временное и стационарное. Квантовые состояния гармонического осциллятора. Уровни энергии и собственные функции. Собственные функции и собственные значения оператора квадрата углового (орбитального) момента.

Тема 2. Квантово-механическое описание молекулы

лекционное занятие (1 часа(ов)):

Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Решение задачи о состояниях одноэлектронного атома. Угловая и радиальная задачи: сферические и радиальные функции; орбитали s-, p-, d- типа; радиальные функции распределения электронной плотности. Приближение Борна-Оппенгеймера. Электронные и ядерные функции.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Поверхность потенциальной энергии: устойчивые, неустойчивые и метастабильные конфигурации молекул. Построение приближенных решений электронного уравнения. Одноэлектронное приближение. Принцип тождественности частиц и принцип Паули. Определитель Слейтера. Электронная плотность молекулы.

Тема 3. Метод Хартри-Фока

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Фокиан, кулоновские и обменные операторы. Канонические уравнения Хартри-Фока и канонические орбитали. Ограниченный и неограниченный варианты метода Хартри-Фока. Приближение МО ЛКАО.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Метод самосогласованного поля Хартри-Фока-Рутана. Представление о схеме ССП. Понятие базисного набора; орбитали Слейтеровского и Гауссова типа. Молекулярные интегралы.

Тема 4. Учет электронной корреляции

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Вариационный метод: метод конфигурационного взаимодействия (КВ); варианты КВ1, КВ1+2 и полное КВ.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Учет электронной корреляции по теории возмущений Меллера-Плессе (МП); вариант МП2

Тема 5. Основы метода функционала плотности

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Основы метода функционала плотности. Теорема Хоэнберга-Кона и функционал энергии. Уравнения Кона-Шэма.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Обменно-корреляционные функционалы.

Тема 6. Учет влияния среды

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Модель диэлектрического континуума. Реактивное поле Онзагера. Понятие виртуальной полости, окружающей молекулу в среде.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Поле в полости. Метод самосогласованного реактивного поля (SCRF). Метод поляризуемого континуума (PCM).

Тема 7. Топологический анализ распределения электронной плотности

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Теория ?Атомы в молекулах?. Критические точки. Лапласиан электронной плотности.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Понятие молекулярного графа. Понятие атомного бассейна и пути связи.

Тема 8. Полуэмпирические методы квантовой химии

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Приближение нулевого дифференциального перекрывания. Полное пренебрежение дифференциальным перекрыванием (CNDO). Частичное пренебрежение дифференциальным перекрыванием (INDO).

практическое занятие (4 часа(ов)):

Пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрыванием: методы MNDO, AM1, PM3.

Тема 9. Квантово-химические расчеты физических характеристик

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Выбор адекватного расчетного приближения. Расчеты магнитно-резонансных параметров.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Расчеты электрических характеристик ? дипольных моментов и молекулярных поляризуемостей разных порядков.

Тема 10. Применение методов квантовой химии для моделирования органической реакции

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Применение методов квантовой химии для моделирования органической реакции. Понятие поверхности потенциальной энергии и координаты реакции.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Изучение механизмов химических реакций.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Принцип суперпозиции состояний	9	1	подготовка к устному опросу	3	устный опрос
2.	Тема 2. Квантово-механическое описание молекулы	9	2-3	подготовка к устному опросу	5	устный опрос
3.	Тема 3. Метод Хартри-Фока	9	4-5	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
4.	Тема 4. Учет электронной корреляции	9	6-7	подготовка к контрольной работе	6	контрольная работа
5.	Тема 5. Основы метода функционала плотности	9	8-9	подготовка к контрольной работе	6	контрольная работа
6.	Тема 6. Учет влияния среды	9	10-11	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
7.	Тема 7. Топологический анализ распределения электронной плотности	9	12-13	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
8.	Тема 8. Полуэмпирические методы квантовой химии	9	14-15	подготовка к контрольной работе	6	контрольная работа
9.	Тема 9. Квантово-химические расчеты физических характеристик	9	16	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
10.	Тема 10. Применение методов квантовой химии для моделирования органической реакции	9	17-18	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
	Итого				54	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

- демонстрацией слайдов с применением мультимедийной техники,
 - использованием интернет-ресурсов различных поисковых систем, таких как <https://bse.pnl.gov/bse/portal> (Basis Set Exchange: A Community Database for Computational Sciences); <http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/> (Gamess, Firefly Program packages); <http://www.gaussian.com/> (GAUSSIAN) и др.
 , www.chem.msu.ru, www.Scirus.com, а также сайтов государственных ВУЗов: МГУ, СПбГУ, НГУ, ИК СО РАН, Scientifica, ChemWeb, ResearchIndex, ScientificWorld

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Принцип суперпозиции состояний

устный опрос , примерные вопросы:

1. Основные принципы квантовой механики. 2. Эрмитовы операторы, их собственные векторы и собственные значения.

Тема 2. Квантово-механическое описание молекулы

устный опрос , примерные вопросы:

3. Классификация электронных состояний молекул и классификация молекулярных орбиталей по симметрии; σ - и π - орбитали. 4. Уравнение Шредингера: временное и стационарное.

Тема 3. Метод Хартри-Фока

устный опрос , примерные вопросы:

5. Водородоподобные орбитали, графическое представление их радиальных и угловых частей. 6. Приближения, используемые при решении уравнения Шредингера.

Тема 4. Учет электронной корреляции

контрольная работа , примерные вопросы:

7. Одноэлектронное приближение. Принцип тождественности частиц и принцип Паули. Определитель Слейтера. 8. Метод Хартри-Фока. Фокиан, кулоновские и обменные операторы.

Тема 5. Основы метода функционала плотности

контрольная работа , примерные вопросы:

9. Приближение МО ЛКАО. 10. Понятие базисного набора; орбитали Слейтеровского и Гауссова типа. Молекулярные интегралы.

Тема 6. Учет влияния среды

устный опрос , примерные вопросы:

11. Способы учета электронной корреляции. Конфигурационное взаимодействие. 12. Общие положения теории возмущений. Теория возмущений Меллера-Плессе.

Тема 7. Топологический анализ распределения электронной плотности

устный опрос , примерные вопросы:

13. Теория функционала плотности (DFT). 14. Континуальные модели описания среды. Реактивное поле Онзагера.

Тема 8. Полуэмпирические методы квантовой химии

контрольная работа , примерные вопросы:

15. Модель поляризуемого континуума. 16. Теория ?Атомы в молекулах?.

Тема 9. Квантово-химические расчеты физических характеристик

устный опрос , примерные вопросы:

17. Понятие молекулярного графа. 18. Общие представления о полуэмпирических методах квантовой химии. 19. Полное пренебрежение дифференциальным перекрыванием (CNDO). 20. Пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрыванием: методы MNDO, AM1, PM3.

Тема 10. Применение методов квантовой химии для моделирования органической реакции

устный опрос , примерные вопросы:

21. Выбор адекватного расчетного приближения для расчеты физических характеристик. 22. Расчеты магнитно-резонансных параметров. 23. Расчеты дипольных моментов и молекулярных поляризуемостей разных порядков. 24. Анализ заселенностей; расчет зарядов на атомах и порядков связей связей. 25. Моделирование химических реакций. 26. Понятие поверхности потенциальной энергии и координаты реакции.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

Вопросы к зачету и контрольным работам

1. Основные принципы квантовой механики.
2. Эрмитовы операторы, их собственные векторы и собственные значения.

3. Классификация электронных состояний молекул и классификация молекулярных орбиталей по симметрии; σ - и π - орбитали.
4. Уравнение Шредингера: временное и стационарное.
5. Водородоподобные орбитали, графическое представление их радиальных и угловых частей.
6. Приближения, используемые при решении уравнения Шредингера.
7. Одноэлектронное приближение. Принцип тождественности частиц и принцип Паули. Определитель Слейтера.
8. Метод Хартри-Фока. Фокиан, кулоновские и обменные операторы.
9. Приближение МО ЛКАО.
10. Понятие базисного набора; орбитали Слейтеровского и Гауссова типа. Молекулярные интегралы.
11. Способы учета электронной корреляции. Конфигурационное взаимодействие.
12. Общие положения теории возмущений. Теория возмущений Меллера-Плессе.
13. Теория функционала плотности (DFT).
14. Континуальные модели описания среды. Реактивное поле Онзагера.
15. Модель поляризуемого континуума.
16. Теория "Атомы в молекулах".
17. Понятие молекулярного графа.
18. Общие представления о полуэмпирических методах квантовой химии.
19. Полное пренебрежение дифференциальным перекрыванием (CNDO).
20. Пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрыванием: методы MNDO, AM1, PM3.
21. Выбор адекватного расчетного приближения для расчета физических характеристик.
22. Расчеты магнитно-резонансных параметров.
23. Расчеты дипольных моментов и молекулярных поляризуемостей разных порядков.
24. Анализ заселенностей; расчет зарядов на атомах и порядков связей связей.
25. Моделирование химических реакций.
26. Понятие поверхности потенциальной энергии и координаты реакции.

Вопросы для текущего контроля

Текущий контроль 1

Функция состояний и операторы наблюдаемых. Стационарное уравнение Шредингера. Основные свойства волновых функций. Нормировка волновых функций. Эрмитовы операторы, их собственные значения и собственные функции. Разложение по базису. Измерения в квантовой механике. Одномерное движение. Задача о гармоническом осцилляторе. Атом водорода.

Метод самосогласованного поля. Одноэлектронное приближение. Метод Хартри-Фока. Молекула водорода. Метод Хартри-Фока-Рутана. Слейтеровский детерминант. Базис атомных орбиталей.

Текущий контроль 2

Конфигурационное взаимодействие. Теория возмущений в формализме Меллера-Плессе (МП). Метод функционала плотности. Теорема Хоэнберга-Кона и функционал энергии. Уравнения Кона-Шэма. Обменно-корреляционные функционалы.

Текущий контроль 3

Приближения, лежащие в основе континуальных моделей. Реактивное поле Онзагера. Форма и размеры виртуальной полости, окружающей молекулу в среде. Поле Лорентца. Метод самосогласованного реактивного поля (SCRF). Метод поляризуемого континуума (PCM).

Основные понятия теории "Атомы в молекулах" Бейдера. Топологический анализ распределения электронной плотности. Собственные значения Гессiana. Классификация критических точек (ранг и сигнатура). Лапласиан электронной плотности. Критические точки Лапласиана. Основные составляющие молекулярного графа.

Краткая характеристика полуэмпирические методы квантовой химии. Приближение нулевого дифференциального перекрытия. Параметризация полуэмпирических методов. Пренебрежение двухатомным дифференциальным перекрытием: методы MNDO, AM1, PM3.

Текущий контроль 4

Выбор адекватного расчетного приближения для расчетов физических характеристик молекулярной системы (выбор метода, требования к базисному набору). Расчеты параметров спектров ЯМР и ЭПР. Расчеты электрических характеристик - дипольных моментов и молекулярных поляризуемостей разных порядков.

Моделирования органической реакции. Понятие поверхности потенциальной энергии и координаты реакции. Изучение механизмов химических реакций

7.1. Основная литература:

1. Н.Ф.Степанов Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, 2001, 519 с.
2. Р. Бейдер. Атомы в молекулах: квантовая теория. - М.: Мир, 2001.

7.2. Дополнительная литература:

- 1.П. Эткинс. Кванты: справочник концепций. М.: Мир, 1977, 496 с.
- 2.Цюлик П. Квантовая химия. М.: Мир, 1976, 512 с.
- 3.Заградник Р., Полак Р. Основы квантовой химии. М.: Мир, 1979.
- 4.В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. М.: Химия, 1986, 246 с.
- 5.Г.И. Жидомиров, П.В. Счастнев, Н.Д. Чувылкин. Квантовохимические расчеты магнитно-резонансных параметров. Новосибирск: Наука, 1978, 367 с.
- 6.Г.И. Жидомиров, А.А. Багатурьянц, И.А. Абронин. Прикладная квантовая химия. М.: Химия, 1979, 295
- 7.В.И.Минкин, Б.Я.Симкин, Р.М.Миняев. Теория строения молекул (Электронные оболочки): М.: Высшая школа, 1997, 407 с.
- 8.С. Фудзинага. Метод молекулярных орбиталей. М.: Мир, 1983.
- 9.Р. Мак-Вини, Б. Сатклиф. Квантовая механика молекул. М.: Мир, 1972.
- 10.С. Уилсон. Электронные корреляции в молекулах. М.: Мир, 1987. – С.304.
- 11.Р. Carsky, M. Urban. Ab Initio Calculations. Methods and applications in chemistry. Lecture notes in Chemistry. Berlin: Verlag, 1980. - V. 16. - P. 235.
- 12.R.J. Gillespie, P.L.A. Popelier. Chemical bonding and Molecular geometry: From Lewis to Electron densities. Oxford University Press, NY, 2001. – P.268.
- 13.Т. Кларк. Компьютерная химия. - М.: Мир, 1990. - 383с
14. Полуэмпирические методы расчета электронной структуры. Под ред. Дж. Сигала. – М.: Мир, 1980.- Т.1, С.328; Т.2, С.373.

7.3. Интернет-ресурсы:

- Scirus - for scientific information - www.Scirus.com
поисковая система - www.yahoo.ru
поисковая система - www.rambler.ru
российская информационная сеть - www.chem.msu.ru

электронная библиотека - www.rushim.ru

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Освоение дисциплины "Квантовая химия" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "КнигаФонд", доступ к которой предоставлен студентам. Электронно-библиотечная система "КнигаФонд" реализует легальное хранение, распространение и защиту цифрового контента учебно-методической литературы для вузов с условием обязательного соблюдения авторских и смежных прав. КнигаФонд обеспечивает широкий законный доступ к необходимым для образовательного процесса изданиям с использованием инновационных технологий и соответствует всем требованиям новых ФГОС ВПО.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по специальности: 020201.65 "Фундаментальная и прикладная химия" и специализации Аналитическая химия .

Автор(ы):

Аминова Р.М. _____

Балакина М.Ю. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Салихов К.М. _____

"__" _____ 201__ г.

Лист согласования

N	ФИО	Согласование
1	Евтюгин Г. А.	Согласовано
2	Бычкова Т. И.	Согласовано
3	Чижанова Е. А.	Согласовано с замечаниями Учебными изданиями, указанными в пп.1,2 списка основной литературы, дисциплина обеспечена ниже норматива. Требованиям к обновляемости фонда учебной и научной литературы, издания, указанные в пп.1,2 списка основной литературы, не соответствуют.
4	Соколова Е. А.	
5	Тимофеева О. А.	