

Программа утверждена на заседании
Ученого совета Факультета наук о материалах
МГУ имени М.В.Ломоносова
Протокол № 173 от 25 сентября 2014 г.

Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Наименование дисциплины (модуля): Основы квантовой и вычислительной химии

Краткая аннотация: Курс рассчитан на аспирантов, обучающихся на факультете наук о материалах и химическом факультете. Конечной целью изучения дисциплины является освоение квантово-механических и физических основ современных методов вычислительной химии. Развитие представлений об *ab initio* и полуэмпирических методах квантовой химии, методах молекулярной динамики и хеминформатики. В курсе предусмотрены практические занятия с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ.

2. Уровень высшего образования – подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре

3. Направление подготовки: 04.06.01 Химические науки.

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: Вариативная часть ООП, дисциплина (модуль), которую учащийся может освоить на выбор из списка предложенных в период обучения, отмеченный в базовом учебном плане, в течение 1 или 2 года обучения, во 2 или 3 семестре (по выбору аспиранта), блок 1 «Дисциплины (модули)».

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

<i>Формируемые компетенции (код компетенции)</i>	<i>Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)</i>
УК-2 способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	31 (УК-2) Знать методы научно-исследовательской деятельности

ОПК-1 способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	У1 (ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности расчетно-теоретические методы исследования
ПК-1 Способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.01 Неорганическая химия	В1(ПК-1) Владеть навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях, в части теоретического моделирования веществ и материалов 34 (ПК-1) Знать современное состояние науки в области вычислительной химии
ПК-4 Способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.04 Физическая химия	В1(ПК-4) Владеть навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях, в части теоретического моделирования веществ и материалов 34 (ПК-4) Знать современное состояние науки в области вычислительной химии
ПК-12 Способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.14 Радиохимия	В1(ПК-14) Владеть навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях, в части теоретического моделирования веществ и материалов 34 (ПК-14) Знать современное состояние науки в области вычислительной химии
ПК-16 Способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.21 Химия твердого тела	В1(ПК-16) Владеть навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях, в части теоретического моделирования веществ и материалов 34 (ПК-16) Знать современное состояние науки в области вычислительной химии

6. 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 3 зачетные единицы, всего 108 часов, из которых 40 часов составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (24 часа занятия лекционного и семинарского типа, 12 часов практических занятий, 4 часа мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации), 68 часов составляет самостоятельная работа учащегося.

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

В специалитете или магистратуре должны быть освоены общие курсы «Квантовая механика», «Математический анализ», «Линейная алгебра», «Физическая химия». Учащиеся должны иметь навыки работы с различными операционными системами и представление о скриптовых языках программирования

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

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), Форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы из них		
		Занятия лекционного типа	Практические занятия	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Выполнение практических заданий	Всего
Раздел 1. Основы квантовой механики, ab initio методы квантовой химии	36	8	4	-	-	-	12	-	24	24
Раздел 2. Теория функционала плотности, полуэмпирические методы.	36	8	4	-	-	-	12	-	24	24
Раздел 3. Непрерывная среда, прочие модели	32	8	4	-	-	-	12	-	20	20
Промежуточная аттестация <u>зачет по курсу</u>	4	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Итого	108	24	12	-	-	-	40	-	68	68

8. Образовательные технологии.

Традиционные лекции, включающие решение задач. Практические занятия.

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

Программа курса, распечатки лекций, план занятий, перечень домашних заданий.

10. Ресурсное обеспечение:

Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Ландау, Л. Д., Лифшиц, Е. М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). — Издание 4-е. — М.: Наука, 1989. («Теоретическая физика», том III)
2. Mueller M. R. Fundamentals of Quantum Chemistry. Molecular Spectroscopy and Modern Electronic Structure Computations. — Kluwer, 2001.
3. Koch W., Holthausen M. C. A Chemist's Guide to Density Functional Theory. 2-ed. — Wiley, 2001.
4. Reiher M., Wolf A. «Relativistic Quantum Chemistry. The Fundamental Theory of Molecular Science» — Wiley-VCH, 2014.
5. Kaldor, U.; Wilson, Stephen «Theoretical Chemistry and Physics of Heavy and Superheavy Elements» — Dordrecht, Netherlands: Kluwer Academic Publishers, 2003.
6. Фок В. А. Начала квантовой механики. — М.: Наука, 1976.
7. Слэтер Дж. Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел / Пер. с англ. — М.: Мир, 1978.
8. Parr R. G., Yang W. Density-Functional Theory of Atoms and Molecules. — New York: Oxford University Press, 1989.

Дополнительная литература

1. Hohenberg P., Kohn W. Phys. Rev. 136 (1964)
2. Kohn W., Sham L. J. Phys. Rev. 140 (1965)
3. Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел. М.: Наука, 1967
4. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978
5. Stephen Wilson, Peter F. Bernath, Roy McWeeny Handbook of Molecular Physics and Quantum Chemistry, Wiley, 2003.

Интернет-ресурсы:

<https://bse.pnl.gov/bse/portal> - база базисных наборов

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости):

Программы для обеспечения удаленного доступа к суперкомпьютеру: Putty, Puttygen, PSCP. Молекулярный редактор GABEDIT. Квантово-химический пакет NwChem.

11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватели:

Митрофанов Артем Александрович, mitrofjr@gmail.com

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

1. Планируемые результаты обучения для формирования компетенций п.5 и соответствующие им критерии оценивания приведены в Приложении 1.

2. Примеры вопросов к семинарам:

- Постулаты квантовой механики
- Поведение частицы в потенциальной яме
- Решение уравнения Шредингера для атома водорода
- Детерминант Слейтера
- Метод Хартри-Фока
- Учет электронной корреляции
- Теория функционала плотности
- Учет влияния среды
- Квантовая химия твердого тела
- Релятивизм в квантовой химии
- Молекулярная динамика
- Хемоинформатика, QSPR - модели

3. Примеры практических заданий:

- Сравнить базисные наборы def2-TZVP и 6-31+G. Описать приближения, использующиеся в каждом из наборов. Оценить относительные затраты времени на расчет.

- Сравнить базисные наборы aug-ss-PVDZ и 6-311+G*. Описать приближения, использующиеся в каждом из наборов. Оценить относительные затраты времени на расчет.
- Найти структуру слоистого нитрида бора в открытой базе данных. Построить трехмерную модель.

4. Вопросы к зачету

Теоретические вопросы (1 на зачет):

- Постулаты квантовой механики
- Поведение частицы в потенциальной яме
- Решение уравнения Шредингера для атома водорода
- Детерминант Слейтера
- Метод Хартри-Фока
- Учет электронной корреляции
- Теория функционала плотности
- Базисные наборы
- Учет влияния среды
- Квантовая химия твердого тела
- Релятивизм в квантовой химии
- Молекулярная динамика
- Полуэмпирические модели
- Хемоинформатика, QSPR - модели

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Зачет проводится по билетам. Билет включает один теоретический вопрос и три задачи. Для подготовки ответа аспирант использует экзаменационные листы, которые сохраняются после приема зачета в течение года. На каждого аспиранта заполняется протокол приема зачета, в который вносятся вопросы билетов. В случае, если на все вопросы были даны удовлетворительные ответы, аспирант получает зачет. Ведомость приема зачета подписывается членами комиссии, принимающими зачет.

**Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине Основы квантовой и вычислительной химии
на основе карт компетенций выпускников**

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю) и ШКАЛА оценивания					ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ*
	1	2	3	4	5	
31 (УК-2) Знать методы научно-исследовательской деятельности	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания по методам научно-исследовательской деятельности	Общие, но не структурированные знания по методам научно-исследовательской деятельности	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания по методам научно-исследовательской деятельности	Сформированные систематические знания по методам научно-исследовательской деятельности	Зачет в форме индивидуального собеседования
У1 (ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности расчетно-теоретические методы исследования	Отсутствие умений	Частично освоенное умение выбирать и применять в профессиональной деятельности расчетно-теоретические методы исследования	В целом успешно, но не систематически осуществляемые умения выбирать и применять в профессиональной деятельности расчетно-теоретические методы исследования	В целом успешно, но содержащие отдельные пробелы в умении выбирать и применять в профессиональной деятельности расчетно-теоретические методы исследования	Сформированное умение анализировать, выбирать и применять в профессиональной деятельности расчетно-теоретические методы исследования	практическое решение задач

34 (ПК-1) Знать современное состояние науки в области вычислительной химии	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания со временного состояния науки в области вычислительной химии	Неполные знания современного состояния науки в области вычислительной химии	Сформированны е, но содержащие отдельные пробелы знания современного состояния науки в области вычислительной химии	Сформированны е и систематические знания современного состояния науки в области вычислительной химии	Зачет в форме индивидуального собеседования
B1 (ПК-1) Владеть навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях, в части теоретического моделирования веществ и материалов	Отсутствие владений	Фрагментарные владения навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарн ых областях	Неполные владения навыками анализа методологическ их проблем, возникающих при решении исследовательск их и практических задач, в том числе в междисциплина рных областях	Сформированны е, но содержащие отдельные пробелы владения навыками анализа методологическ их проблем, возникающих при решении исследовательск их и практических задач, в том числе в междисциплина рных областях	Сформированны е и систематические владения навыками анализа методологическ их проблем, возникающих при решении исследовательск их и практических задач, в том числе в междисциплина рных областях	Зачет в форме индивидуального собеседования