

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Физический факультет

УТВЕРЖДЕНО:
Декан физического факультета
С.Н. Филимонов

Рабочая программа дисциплины

Компьютерная квантовая химия

по направлению подготовки

03.04.02 Физика

Направленность (профиль) подготовки:
«Фундаментальная и прикладная физика»

Форма обучения
Очная

Квалификация
Магистр

Год приема
2023

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
О.Н. Чайковская

Председатель УМК
О.М. Сюсина

Томск – 2023

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ПК-1 – Способен самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего российского и зарубежного опыта;

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

– ИПК-1.1 – Знает основные стратегии исследований в выбранной области физики, критерии эффективности, ограничения применимости;

– ИПК-1.2 – Умеет выделять и систематизировать основные цели исследований в выбранной области физики, извлекать информацию из различных источников, включая периодическую печать и электронные коммуникации, представлять её в понятном виде и эффективно использовать.

2. Задачи освоения дисциплины

– Освоить основные идеи, примеры и свойства, математических моделей, приводящие к представлениям о симметрии.

– Научиться применять методы квантовой химии к построению и анализу моделей физико-химических процессов в газовых средах и явлений, выработать навыки решения практических задач профессиональной деятельности.

3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплины (модули)».

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Семестр 2, экзамен

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются компетенции, сформированные в ходе освоения образовательных программ предшествующего уровня образования.

В качестве входных знаний студенты должны владеть основными понятиями и методами дифференциального и интегрального исчисления, линейной алгебры, векторного и тензорного анализа, теории симметрии, основными понятиями квантовой механики, классической теории электромагнетизма.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

– лекции: 16 ч.;

– практические занятия: 16 ч.

В том числе практическая подготовка: 16 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Тема 1. Основные постулаты квантовой химии. Уравнение Шредингера для атома водорода.

Тема 2. Уравнение Хартри-Фока. Многоэлектронные атомы.

Тема 3. Уравнения Рутаана. Базисные наборы. Молекулярные орбитали.

Тема 4. Электронная корреляция. Методы учета электронной корреляции.

Тема 5. Метод конфигурационного взаимодействия.

Тема 6. Методы теории возмущений и связанных кластеров.

Тема 7. Полуэмпирические методы. Метод Хюккеля.

Тема 8. Базисные наборы функций. Примеры.

Тема 9. Теория функционала плотности.

Тема 10. Приближение Борна-Оппенгеймера. Неадиабатические поправки.

Тема 11. Релятивистская квантовая химия. Основные приближения. Спин-спиновое и спин-орбитальное взаимодействие.

Тема 12. Химическая связь в молекулах. Валентные и остовные электроны. Неподделенные пары электронов. Кратные связи. Классификация органических соединений. Ароматичность.

Тема 13. Электронные спектры молекул и их моделирование с помощью квантово-химических методов. Теория отклика.

Тема 14. Электрические и магнитные свойства молекул.

Тема 15. Идеология квантово-химических вычислительных пакетов.

Тема 16. Примеры современных научных исследований с использованием методов квантовой химии.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине осуществляется путем контроля посещаемости лекционных и практических занятий, проверки практических заданий и сдачи отчетов по выполненным заданиям, и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр. Оценочные материалы текущего контроля размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Экзамен проводится в письменной форме по билетам. Продолжительность экзамена 2,5 часа.

Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» – <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» – <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=24585>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине (<https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>).

в) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

Вопросы, вынесенные на самостоятельное изучение.

1. Физическая химия. Термодинамические потенциалы.
2. Химические реакции. Энергия активации. Потенциальный барьер.
3. Термохимия. Энергия Гиббса, константы равновесия, константы скоростей химических реакций.
4. Сольватохромные эффекты

План практических занятий:

1. Оптимизация геометрии молекулы различными уровнями теории.
2. Расчет частот нормальных колебаний.
3. Моделирование колебательных спектров молекул.
4. Моделирование электронных спектров молекул.
5. Моделирование ЯМР спектров
6. Моделирование фотофизических характеристик молекул.
7. Спин-орбитальные и спин-спиновые взаимодействия в молекулах.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

1. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Ростов– на-Дону: Феникс, 1997. – 560 с.
2. Кук. Д. Квантовая теория молекулярных систем. Единый подход. Москва: Интеллект, 2012. –256 с.
3. Нурмухаметов Р.Н. Поглощение и люминесценция ароматических соединений. М.: Химия, 1971. - 216 с.

б) дополнительная литература:

1. Валиев Р.Р., Черепанов В.Н. Практическое руководство по программному пакету “GAMESS” для АВ INITIO квантово-химических расчетов. Томск: Томский государственный университет, 2012. – 52 с.

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

- Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);
- публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

- Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>
- Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
- ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>
- ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>
- Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
- ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>
- ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

15. Информация о разработчиках

Валиев Рашид Ринатович, доктор химических наук, доцент, кафедра оптики и спектроскопии физического факультета ТГУ.

Черепанов Виктор Николаевич, доктор физико-математических наук, доцент, кафедра оптики и спектроскопии физического факультета ТГУ, заведующий кафедрой.