

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

Физический факультет

УТВЕРЖДАЮ:

Декан физического факультета



С.Н. Филимонов

«15» апреля 2021 г.



Рабочая программа дисциплины

Компьютерная квантовая химия

по направлению подготовки

03.04.02 – Физика

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

Форма обучения

Очная

Квалификация

Магистр

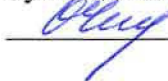
Год приема

2021

Код дисциплины в учебном плане: **Б1.В.ДВ.01.02.07**

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП



О.Н. Чайковская

Председатель УМК



О.М. Сюсина

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 области компьютерной квантовой химии, критерии эффективности, ограничения применимости

- ИПК-1.2. Умеет выделять и систематизировать основные цели исследований в компьютерной квантовой химии, 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 части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, входит в профессиональный модуль по выбору «Физика атомов и молекул».

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.;

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. Неподеленные 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 проводится с применением балльно-рейтинговой системы, включающей контроль посещаемости, результаты выполнения контрольных работ, заданий и тестов по материалам курсу, и фиксируется в форме баллов (нарастающим итогом): посещаемость – максимальный балл 10, выполнение контрольных заданий – 20, Контрольная точка проводится не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Экзамен проводится в письменной форме по билетам. Продолжительность экзамена 1,5 часа.

На промежуточную аттестацию планируется не более 40% рейтинга.

Результаты экзамена определяются исходя из результатов ответа и текущей аттестации в течение семестра и согласуется с принятым соответствием с 5-ти балльной шкалой оценивания: 99-86 – «отлично»; 85-66 – «хорошо»; 65-45 – «удовлетворительно», менее 45 – «неудовлетворительно».

Экзаменационный билет состоит из двух частей.

Первая часть представляет собой 2 вопроса, проверяющих сформированность компетенций ПК-1 в соответствии с индикаторами ИПК-1.1, ИПК 1.2.

Ответ дается в развернутой форме.

Вторая часть содержит 1 дополнительный вопрос по курсу, проверяющий соответствие индикатору достижения компетенции ИПК-1.2. Ответ на вопрос второй части дается в краткой форме, включающей краткую интерпретацию полученных результатов.

Примерный перечень теоретических вопросов:

1. Основные постулаты квантовой химии. Уравнение Шредингера для атома водорода.
2. Многоэлектронные атомы. Метод самосогласованного поля.
3. Электронная корреляция. Методы учета электронной корреляции.
4. Теория функционала плотности.
5. Приближенные методы квантовой химии.
6. Электрические и магнитные свойства молекул.
7. Критерии ароматичности.
8. Электронные спектры молекул.

11. Учебно-методическое обеспечение

- а) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

Методические рекомендации студентам по самостоятельной работе.

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.

Темы для рефератов

1) Химическая кинетика.

2) Теория кристаллического поля.

3) Моделирование вращательных спектров молекул.

Требования к реферату

В реферате на основе всестороннего анализа литературы, интернет-источников магистрант должен максимально полно и глубоко исследовать выбранную тему, с учетом общей направленности программы обучения. В целом, при оформлении реферата (текста, рисунков, таблиц, формул) следует ориентироваться на требования ОСТ 29.115-88 «Оригиналы авторские и текстовые издательские. Общие технические требования». Объем реферата должен составлять не менее 10 страниц формата А-4, представляемой в электронной форме (формат doc, rtf или pdf). Обязательно указывается список использованных источников. Литература: из общего и дополнительного списков, интернет-ресурсы.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

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.

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети Интернет:

1. Электронный каталог НБ ТГУ (<http://chamo.lib.tsu.ru>)
2. Библиографическая база данных SCOPUS (<http://www.scopus.com/>)
3. Библиографическая база данных ISI Web of Knowledge (<http://www.isiknowledge.com/>)
4. Поисковая система Google Scholar (<https://scholar.google.ru/>)
5. Электронные версии специализированных научных журналов

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

Все виды материально-информационной базы Научной библиотеки ТГУ, мультимедийное оборудование физического факультета ТГУ, специализированное лабораторное оборудование кафедры оптики и спектроскопии ТГУ и Центров коллективного пользования ТГУ, суперкомпьютер СКИФ.

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.