

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

Институт прикладной математики и компьютерных наук

УТВЕРЖДАЮ
Директор



А. В. Замятин

« 15 » июля 20 23 г.

Рабочая программа дисциплины

Моделирование межмолекулярных взаимодействий

по направлению подготовки

01.04.02 Прикладная математика и информатика

Направленность (профиль) подготовки :

Интеллектуальный анализ больших данных

Форма обучения

Очная

Квалификация

Магистр

Год приема

2023

Код дисциплины в учебном плане: Б1.В.ДВ.01.02.04

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

_____ А.В. Замятин

Председатель УМК

_____ С.П. Сущенко

Томск – 2023

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ПК-4 – способность определять проблемную ситуацию, ставить задачи анализа данных в области профессиональной деятельности, выбрать методы и использовать специализированные знания для её решения.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИПК-4.1 Определяет проблемную ситуацию и ставит задачу анализа данных в области профессиональной деятельности.

ИПК-4.2 Собирает и обрабатывает данные в области профессиональной деятельности, знает и использует специфику таких данных.

ИПК-4.3 Выбирает методы анализа данных в области профессиональной деятельности.

ИПК-4.4 Разрабатывает концепцию и техническое задание на решение задачи в области профессиональной деятельности на основе анализа данных.

2. Задачи освоения дисциплины

– Дать студентам физико-химические основы межмолекулярных взаимодействий и теоретических методах их исследования для применения в области молекулярных систем, включая биологические среды.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор. Дисциплина входит в модуль «Биоинформатика и биомедицина».

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

Четвертый семестр, экзамен

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: Медицинская диагностика с использованием машинного обучения и биофотоника, Нелинейные методы в биофизике.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 часов, из которых:

-лекции: 16 ч.

-лабораторные: 32 ч.

в том числе практическая подготовка: 0 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Раздел 1. Введение в физику межмолекулярного взаимодействия

Введение. Классификация межмолекулярных сил. Короткодействующие и дальнедействующие силы. Понятия электростатической, индукционной и дисперсионной энергий. Эффекты задержки взаимодействия. Магнитные эффекты.

Раздел 2. Основы теории межмолекулярного взаимодействия

Общая теория дальнедействующих межмолекулярных сил. Гамильтониан взаимодействия пары молекул. Мультипольные электрические моменты молекул. Связь мультипольных моментов молекулы с индуцированным ей потенциалом, напряженностью поля и его градиентами на взаимодействующей с ней молекулой.

Раздел 3. Энергия взаимодействия молекул

Связь электростатической энергии взаимодействия с мультипольными моментами. Индукционная энергия и ее связь со статическими молекулярными поляризуемостями. Дисперсионная энергия и ее связь с динамическими поляризуемостями на мнимых частотах. Энергия взаимодействия атомных комплексов.

Раздел 4. Индукционные дипольные моменты

Дипольный момент взаимодействующих молекул. Приближение "constant ratio". Дипольный момент взаимодействующих атомов и молекул.

Раздел 5. Индукционная, дисперсионная поляризуемость

Поляризуемость взаимодействующих молекул. Гиперполяризуемость взаимодействующих молекул. Методы расчета мультипольных моментов и (высших) поляризуемостей молекул. Примеры расчета энергии взаимодействия и электрических свойств.

Раздел 6. Введение в квантовую вычислительную химию

Основные постулаты квантовой химии. Уравнение Шредингера для атома водорода. Уравнение Хартри-Фока. Многоэлектронные атомы. Уравнения Рутаана. Базисные наборы. Молекулярные орбитали.

Раздел 7. Методы квантовой химии

Метод конфигурационного взаимодействия. Методы теории возмущений и связанных кластеров. Полуэмпирические методы. Метод Хюккеля. Базисные наборы функций. Примеры. Теория функционала плотности. Приближение Борна-Оппенгеймера. Неадиабатические поправки.

Раздел 8. Фотофизика и фотохимия

Основные законы фотофизики. Безызлучательные процессы. Скорости внутренней и интеркомбинационной конверсий. Релятивистская квантовая химия. Основные приближения. Спин-спиновое и спин-орбитальное взаимодействие. Химическая связь в молекулах. Валентные и остовные электроны. Неподделенные пары электронов. Кратные связи. Классификация органических соединений. Ароматичность. Электронные спектры молекул и их моделирование с помощью квантово-химических методов.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль освоения дисциплины осуществляется в виде проведения регулярного экспресс-тестирования по пройденному материалу и проверки знаний при допуске к выполнению лабораторных работ.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация проводится в виде сдачи отчетов по лабораторным занятиям. Завершающая аттестация по курсу проводится в форме экзамена.

Перечень вопросов, выносимых на экзамен

1. Классификация межмолекулярных сил. Короткодействующие и дальнедействующие силы.
2. Понятия электростатической, индукционной и дисперсионной энергий.

- Эффекты задержки взаимодействия. Магнитные эффекты.
3. Гамильтониан взаимодействия пары молекул.
 4. Мультипольные электрические моменты молекул.
 5. Связь мультипольных моментов молекулы с индуцированным ей потенциалом, напряженностью поля и его градиентами на взаимодействующей с ней молекулой.
 6. Связь электростатической энергии взаимодействия с мультипольными моментами.
 7. Энергия молекулы и ее мультипольные моменты во внешнем однородном и неоднородном полях.
 8. Поляризуемости и высшие поляризуемости молекул.
 9. Определение электрических мультипольных моментов и (высших)поляризуемостей молекул через энергию молекулы во внешнем электрическом поле.
 10. Отклик молекулы на гармоническое осциллирующее поле.
 11. Комплексные мультипольные моменты и (высшие)поляризуемости.
 12. Индукционная энергия и ее связь со статическими молекулярными поляризуемостями.
 13. Дисперсионная энергия и ее связь с динамическими поляризуемостями на мнимых частотах.
 14. Дипольный момент взаимодействующих молекул.
 15. Приближение "constant ratio": CRA1 и CRA2.
 16. Поляризуемость взаимодействующих молекул.
 17. Гиперполяризуемость взаимодействующих молекул.
 18. Методы расчета мультипольных моментов и (высших)поляризуемостей молекул. Численный метод конечных разностей.
 19. Уравнение Хартри-Фока.
 20. Уравнения Рутаана. Базисные наборы. Молекулярные орбитали.
 21. Полуэмпирические методы. Метод Хюккеля.
 22. Ароматичность.
 23. Электронная корреляция. Методы учета электронной корреляции.
 24. Теория функционала плотности.
 25. Приближение Борна-Оппенгеймера. Неадиабатические поправки.

11. Учебно-методическое обеспечение

- а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle»
- б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

- а) основная литература:
 - Келих С. Молекулярная нелинейная оптика. – М.: гл. ред. физ.-мат. лит., 1981.
 - Под. ред Б. Пюльмана. Межмолекулярные взаимодействия: от двухатомных молекул до полимеров. – М.: Мир, 1981.
- б) дополнительная литература:
 - Каплан И.Г. Межмолекулярные взаимодействия. физическая интерпретация компьютерные расчеты и модельные потенциалы. – М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2015.
 - Stone A.J. The Theory of intermolecular forces. – Oxford, 2002.

- Salam A. Molecular quantum electrodynamics. Long-range Intermolecular Interactions. – Wiley, 2010.
- Cherepanov V.N., Kalugina Yu.N., Buldakov M.A. Interaction-induced electric properties of van der Waals complexes. – Springer, 2017.
- Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. – Ростов– на-Дону: Феникс, 1997.
- Кук. Д. Квантовая теория молекулярных систем. Единый подход. – Москва: Интеллект, 2012.
- Нурмухаметов Р.Н. Поглощение и люминесценция ароматических соединений. – М.: Химия, 1971.

13. Перечень информационных технологий

- а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:
 - Презентации с использованием пакетов MS Office и OpenOffice;
 - специализированное программное обеспечение для проведения квантовохимических расчетов; библиографические базы данных SCOPUS и ISI Web of Science; Поисковая система Google Scholar.

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.

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.

15. Информация о разработчиках

Черепанов Виктор Николаевич, д-р физ.-мат. наук, доцент, заведующий кафедрой оптики и спектроскопии