

Рабочая программа дисциплины

1. Название дисциплины: Вычислительные методы квантовой химии

2. Уровень высшего образования – магистратура

3. Направление подготовки: 03.04.02 Физика (магистратура)

4. Аннотация:

Курс «Основы квантовой химии» является профильной дисциплиной магистерской программы «Квантовые вычисления». Целью освоения дисциплины является 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 для решения задач, стоящих перед теоретической и экспериментальной химической наукой.

5. Объем дисциплины 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 (указывается согласно рабочему плану):

Объем дисциплины составляет 2 зачетные единицы, всего 72 часа, из которых 36 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (18 часов занятия лекционного типа, 16 часов занятия семинарского типа, 2 часа коллоквиумов), 36 часов составляет самостоятельная работа обучающегося.

6. Формируемые компетенции и входные требования для освоения дисциплины, предварительные условия:

НАЗВАНИЕ КОМПЕТЕНЦИЙ:

СПК-1 Способность свободно владеть профессиональными знаниями для анализа и синтеза физической информации в области физики квантовых вычислений.

СПК-2 Способность к поиску, критическому анализу, обобщению и систематизации научной информации в области физики квантовых вычислений.

СПК-3 Способность организовывать и планировать исследования, ставить конкретные задачи научных исследований в области физики квантовых вычислений, и решать их с помощью современной аппаратуры и оборудования.

ПОРОГОВЫЙ (ВХОДНОЙ) УРОВНЬ ЗНАНИЙ, УМЕНИЙ, ОПЫТА ДЕЯТЕЛЬНОСТИ, ТРЕБУЕМЫЙ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИЙ

Для того чтобы формирование данных компетенций было возможно, обучающийся, приступивший к освоению образовательной программы, должен:

- **ЗНАТЬ:** основные методы научно-исследовательской деятельности.
- **УМЕТЬ:** выделять и систематизировать основные идеи в научных текстах; критически оценивать любую поступающую информацию, вне зависимости от источника; избегать автоматического применения стандартных формул и приемов при решении задач.
- **ВЛАДЕТЬ:** навыками сбора, обработки, анализа и систематизации информации по теме исследования; навыками выбора методов и средств решения задач исследования.

Для освоения дисциплины необходимы знания и умения, приобретаемые в рамках дисциплин высшей математики и общей физики, в частности «Атомная физика», «Квантовая механика».

7. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины, форма промежуточной аттестации по дисциплине	Всего, часы	В том числе						
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них				Самостоятельная работа обучающегося, часы из них		
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости коллоквиумы, практические контрольные занятия и др.*	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего
<p>1. Введение. Основные положения и методы квантовой химии.</p> <p>§1. Уравнение Шредингера для атомных и молекулярных систем. Разделение электронных и ядерных переменных. Поверхность потенциальной энергии.</p> <p>§2. Электронное волновое уравнение и электронные состояния молекул. Классификация химических связей по типу изменения электронной плотности при образовании молекулы. Полярность химических связей</p>		6	4		10	4 часа Решение задач	3 часа Повторение лекционного материала по теме «Основные положения и методы квантовой химии»	7

<p>и ее характеристики.</p> <p>§3. Построение приближенных решений электронного волнового уравнения на основе вариационного принципа. Одноэлектронное приближение. Определитель Слэтера. Матричные элементы одно- и двухчастичных операторов в базисе определителей Слэтера. Теорема Бриллюэна.</p> <p>§4. Метод Хартри – Фока (самосогласованного поля, ССП). Фокиан и канонические уравнения Хартри – Фока. Молекулярные орбитали. Принцип заполнения. Определители, собственные для операторов спина. Теорема Купманса и фотоэлектронные спектры. Пределы применимости метода Хартри – Фока.</p> <p>§5. Представление молекулярных орбиталей в виде линейной комбинации атомных орбиталей. Наиболее распространенные типы базисных орбиталей: орбитали слэтеровского и гауссова типа. Сгруппированные (сжатые) базисные орбитали. Метод Хартри – Фока – Ротхана (ССП МО ЛКАО).</p> <p>§6. Электронная корреляция. Метод конфигурационного взаимодействия. Многоконfigurационный метод ССП. Приближение полного активного пространства. Теория возмущений Мёллера – Плессета.</p> <p>§7. Методы функционала электронной плотности. Теорема Хоэнберга– Кона. Обменно-корреляционная энергия.</p>								
---	--	--	--	--	--	--	--	--

<p>2. Теория симметрии электронных состояний молекул</p> <p>§1. Элементы и операции симметрии. Точечные группы симметрии. Представления точечных групп симметрии, неприводимые представления и таблицы характеров. Прямое произведение представлений.</p> <p>§2. Симметрия и свойства молекул. Классификация электронных состояний атомов и молекул и классификация атомных и молекулярных орбиталей по симметрии. Гибридизация и гибридные орбитали. σ- и π-Орбитали. Орбитали симметрии и эквивалентные орбитали. Локальная симметрия. Построение орбиталей симметрии с использованием функций s-, p- и d-типа. Гибридные орбитали.</p> <p>§3. Координационные соединения. Теория кристаллического поля. Анализ расщепления атомных d- и f-уровней в полях различной симметрии. Теория поля лигандов.</p>	6	4	2 часа Коллоквиум по Основным положениям и методы квантовой химии и теории симметрии электронных состояний молекул	10	3 часа Решение задач 3 часа Повторение лекционного материала по теме «Теория симметрии электронных состояний молекул»		6
--	---	---	---	----	--	--	---

<p align="center">3. Прикладные аспекты квантовой химии</p> <p>§1. Полуэмпирические методы квантовой химии. Нулевое дифференциальное перекрывание. π-Электронное приближение и метод Хюккеля для π-электронных систем.</p> <p>§2. Двухатомные молекулы. Корреляционные диаграммы для двухатомных молекул.</p> <p>§3. Качественный анализ геометрического строения малых многоатомных молекул на основе метода молекулярных орбиталей. Диаграммы Уолша.</p> <p>§4. Заряды на атомах и порядки связей по Малликену и по Лёвдину. Корреляции между порядками связей и параметрами геометрического строения.</p> <p>§5. Межмолекулярное взаимодействие. Составляющие межмолекулярного взаимодействия. Водородная связь.</p> <p>§6. Анализ возможных механизмов химических реакций на основе общей структуры потенциальной поверхности. Правила Вудворда – Хофмана. Ограничения подходов, использующих представления о движении изображающей точки по потенциальной поверхности. Роль туннелирования в химических реакциях.</p>	6	4		10	<p>4 часа Решение задач</p> <p>3 часа Повторение лекционного материала по теме «Прикладные аспекты квантовой химии»</p>		7
<p>Промежуточная аттестация - зачет</p>		4		4	16 часов Подготовка к промежуточной аттестации (зачету).		16
<p>Итого</p>	18	16	2	36			36

* Текущий контроль успеваемости в рамках занятий семинарского типа реализуется в форме обсуждения.

8. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине:

8.1 Основная и дополнительная литература доступная студентам через Интернет или по запросу лектору.

9. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

Типовые контрольные вопросы и темы для обсуждения:

1. Уравнение Шредингера
2. Классификация химических связей
3. Метод Хартри – Фока
4. Методы функционала электронной плотности.
5. Симметрия и свойства молекул.
6. Полуэмпирические методы квантовой химии.
7. Двухатомные молекулы.
8. Многоатомные молекулы
9. Межмолекулярное взаимодействие.

Типовые вопросы к зачету:

- Уравнение Шредингера для атомных и молекулярных систем. Разделение электронных и ядерных переменных. Адиабатическое приближение, приближения Борна- Оппенгеймера.
- Поверхность потенциальной энергии (ППЭ). Особые точки на ППЭ. Равновесная конфигурация и конформации. Стационарные и переходные конформации. Сечения ППЭ. Координата реакции. Симметрия поверхности потенциальной энергии.
- Построение приближенных решений электронного волнового уравнения на основе вариационного принципа. Представление молекулярных орбиталей в виде линейной комбинации базисных (атомных) орбиталей. Решение электронного уравнения для системы H_2 .
- Приближенные методы в квантовой химии. Рассмотрение атома гелия в рамках теории возмущений и вариационного метода.
- Одноэлектронное приближение. Определитель Слэтера. Матричные элементы одно- и двухчастичных операторов в базисе определителей Слэтера.
- Электронное волновое уравнение и электронные состояния молекул. Электронная плотность, матрицы плотности, их связь с наблюдаемыми.
- Метод Хартри – Фока (самосогласованного поля, ССП). Фокиан и канонические уравнения Хартри – Фока.

- Молекулярные орбитали в методе Хартри-Фока. Энергии орбиталей, их связь с наблюдаемыми величинами. Принцип заполнения. Спиновая чистота. Теорема Купманса и теорема Бриллюэна.
- Наиболее распространенные типы базисных орбиталей: орбитали слэтеровского и гауссова типа. Сгруппированные (сжатые) базисные орбитали.
- Электронная корреляция. Метод конфигурационного взаимодействия и многоконфигурационный метод ССП. Варианты выбора активного пространства. Правила Слэтера для матричных элементов задачи КВ. Конфигурационная функция состояния.
- Методы функционала электронной плотности. Теорема Хоэнберга – Кона. Обменно- корреляционная энергия.
- Теория возмущений Мёллера – Плессета.
- Элементы и операции симметрии. Точечные группы симметрии. Представления точечных групп симметрии, неприводимые представления и таблицы характеров. Прямое произведение представлений. Проекторы на неприводимое представление. Построение симметризованных орбиталей.
- π -Электронное приближение и метод Хюккеля для π -электронных систем. Порядки связей, заряды на атомах в методе Хюккеля.
- Рассмотрение циклических систем в методе Хюккеля. Правило ароматичности. Антиароматичные системы.
- Симметрия и свойства молекул. Классификация электронных состояний атомов и молекул и классификация атомных и молекулярных орбиталей по симметрии. Гибридизация и гибридные орбитали. σ - и π -орбитали. Связывающие и разрыхляющие орбитали. Валентные и остовные орбитали. Классификация химических связей по типу орбиталей.
- Межмолекулярное взаимодействие. Общая классификация, наиболее значимые взаимодействия для разных расстояний. Электростатическое взаимодействие, мультипольное разложение. Резонансное, поляризационное и обменное взаимодействие.
- Корреляционные диаграммы. Правило непересечения для термов и орбиталей. Пределы объединенного атома и изолированных атомов. Диаграммы Уолша. Правило непересечения для двух- и многоатомных молекул молекул. Высокосимметричные конфигурации, редукция по подгруппе.
- Принцип сохранения орбитальной симметрии. Правила Вудворда-Хофмана. Электроциклические реакции. Теория граничных орбиталей.

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ (ПОКАЗАТЕЛИ ДОСТИЖЕНИЯ ЗАДАННОГО УРОВНЯ ОСВОЕНИЯ КОМПЕТЕНЦИЙ)

ВЛАДЕТЬ: профессиональными знаниями для анализа и синтеза физической информации в области физики квантовых вычислений (В1, СПК-1).

ВЛАДЕТЬ: навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации в области физики квантовых вычислений (В2, СПК-2).

ВЛАДЕТЬ: навыками анализа методологических проблем, возникающих при планировании, организации и решении конкретных исследовательских задач в области физики квантовых вычислений (В3, СПК-3).

УМЕТЬ: анализировать альтернативные варианты решения исследовательских задач в области физики квантовых вычислений и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов (У1, СПК-1).

УМЕТЬ: осуществлять поиск, критический анализ, обобщать и систематизировать научную информацию в области физики квантовых вычислений (У2, СПК-2).

УМЕТЬ: организовывать и планировать исследования, ставить конкретные задачи научных исследований в области физики квантовых вычислений, и решать их с помощью современной аппаратуры и оборудования (У3, СПК-3).

ЗНАТЬ: методы анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новой физической информации при решении исследовательских и практических задач в области физики квантовых вычислений (З1, СПК-1).

ЗНАТЬ: способы критического анализа и систематизации научной информации при решении исследовательских задач в области физики квантовых вычислений (З2, СПК-2).

ЗНАТЬ: методы организации и планирования исследований в области физики квантовых вычислений, включая способы решения задач с помощью современной аппаратуры и оборудования (З3, СПК-3).

Планируемые результаты	Критерии оценивания результатов обучения
-------------------------------	---

обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	1	2	3	4	5
<i>ВЛАДЕТЬ:</i> профессиональными знаниями для анализа и синтеза физической информации в области физики квантовых вычислений (B1, СПК-1).	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков анализа и синтеза физической информации в области физики квантовых вычислений	В целом успешное, но не систематическое применение навыков анализа и синтеза физической инфор- мации в области физики квантовых вычислений	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков анализа и синтеза физической информации в области физики квантовых вычислений	Успешное и систематическое применение навыков анализа и синтеза физической информации в области физики квантовых вычислений
<i>ВЛАДЕТЬ:</i> навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации в области физики квантовых вычислений (B2, СПК-2).	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации в области физики квантовых вычислений	В целом успешное, но не систематическое применение навыков поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации в области физики квантовых вычислений	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков поиска, критического анализа, обобщения и сис- тематизации научной информации в области физики квантовых вычислений	Успешное и систематическое применение навыков поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации в области физики квантовых вычислений
<i>ВЛАДЕТЬ:</i> навыками анализа методологических проблем, возникающих	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков анализа методологи- ческих проблем, возникающих при	В целом успешное, но не систематическое применение навыков анализа методологи- ческих проблем,	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков анализа методологических проблем, возникающих при	Успешное и систематическое применение навыков анали- за методологических проблем, возникающих

при планировании, организации и решении конкретных исследовательских задач в области физики квантовых вычислений (ВЗ, СПК-3).		планировании, организации и решении конкретных исследовательских задач в области физики квантовых вычислений	возникающих при планировании, организации и решении конкретных исследовательских задач в области физики квантовых вычислений	планировании, организации и решении конкретных исследовательских задач в области физики квантовых вычислений	при планировании, организации и решении конкретных исследовательских задач в области физики квантовых вычислений
<i>УМЕТЬ:</i> анализировать альтернативные варианты решения исследовательских задач в области физики квантовых вычислений и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов (У1, СПК-1).	Отсутствие умения	Фрагментарное проявление умения анализировать альтернативные варианты решения исследовательских задач в области физики квантовых вычислений и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов	В целом успешное, но не систематическое проявление умения анализировать альтернативные варианты решения исследовательских задач в области физики квантовых вычислений и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы проявление умения анализировать альтернативные варианты решения исследовательских задач в области физики квантовых вычислений и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов	Успешное и систематическое проявление умения анализировать альтернативные варианты решения исследовательских задач в области физики квантовых вычислений и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов

<p><i>УМЕТЬ:</i> осуществлять поиск, критический анализ, обобщать и систематизировать научную информацию в области физики квантовых вычислений (У2, СПК-2).</p>	<p>Отсутствие умения</p>	<p>Фрагментарное проявление умения осуществлять поиск, критический анализ, обобщать и систематизировать научную информацию в области физики квантовых вычислений</p>	<p>В целом успешное, но не систематическое проявление умения осуществлять поиск, критический анализ, обобщать и систематизировать научную информацию в области физики квантовых вычислений</p>	<p>В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы проявление умения осуществлять поиск, критический анализ, обобщать и систематизировать научную информацию в области физики квантовых вычислений</p>	<p>Успешное и систематическое проявление умения осуществлять поиск, критический анализ, обобщать и систематизировать научную информацию в области физики квантовых вычислений</p>
<p><i>УМЕТЬ:</i> организовывать и планировать исследования, ставить конкретные задачи научных исследований в области физики квантовых вычислений, и решать их с помощью современной аппаратуры и оборудования (У3, СПК-3)</p>	<p>Отсутствие умения</p>	<p>Фрагментарное проявление умения организовывать и планировать исследования, ставить конкретные задачи научных исследований в области физики квантовых вычислений, и решать их с помощью современной аппаратуры и оборудования</p>	<p>В целом успешное, но не систематическое проявление умения организовывать и планировать исследования, ставить конкретные задачи научных исследований в области физики квантовых вычислений, и решать их с помощью современной аппаратуры и оборудования</p>	<p>В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы проявление умения организовывать и планировать исследования, ставить конкретные задачи научных исследований в области физики квантовых вычислений, и решать их с помощью современной аппаратуры и оборудования</p>	<p>Успешное и систематическое проявление умения организовывать и планировать исследования, ставить конкретные задачи научных исследований в области физики квантовых вычислений, и решать их с помощью современной аппаратуры и оборудования</p>

<p><i>ЗНАТЬ:</i> методы анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новой физической информации при решении исследовательских и практических задач в области физики квантовых вычислений (31, СПК-1)</p>	<p>Отсутствие знаний</p>	<p>Фрагментарное проявление знаний методов анализа и оценки современных научных достижений, а также методов генерирования новой физической информации при решении исследовательских и практических задач в области физики квантовых вычислений</p>	<p>В целом успешное, но не систематическое проявление знаний методов анализа и оценки современных научных достижений, а также методов генерирования новой физической информации при решении исследовательских и практических задач в области физики квантовых вычислений</p>	<p>В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы проявление знаний методов анализа и оценки современных научных достижений, а также методов генерирования новой физической информации при решении исследовательских и практических задач в области физики квантовых вычислений</p>	<p>Успешное и систематическое проявление знаний методов анализа и оценки современных научных достижений, а также методов генерирования новой физической информации при решении исследовательских и практических задач в области физики квантовых вычислений</p>
<p><i>ЗНАТЬ:</i> способы критического анализа и систематизации научной информации при решении исследовательских задач в области физики квантовых вычислений (32, СПК-2).</p>	<p>Отсутствие знаний</p>	<p>Фрагментарное проявление знаний способов критического анализа и систематизации научной информации при решении исследовательских задач в области физики квантовых вычислений</p>	<p>В целом успешное, но не систематическое проявление знаний способов критического анализа и систематизации научной информации при решении исследовательских задач в области физики квантовых вычислений</p>	<p>В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы проявление знаний способов критического анализа и систематизации научной информации при решении исследовательских задач в области физики квантовых вычислений</p>	<p>Успешное и систематическое проявление знаний способов критического анализа и систематизации научной информации при решении исследовательских задач в области физики квантовых вычислений</p>

ЗНАТЬ: методы организации и планирования исследований в области физики квантовых вычислений, включая способы решения задач с помощью современной аппаратуры и оборудования (33, СПК-3)	Отсутствие знаний	Фрагментарное проявление знаний методов организации и планирования исследований в области физики квантовых вычислений, включая способы решения задач с помощью современной аппаратуры и оборудования	В целом успешное, но не систематическое проявление знаний методов организации и планирования исследований в области физики квантовых вычислений, включая способы решения задач с помощью современной аппаратуры и оборудования	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы проявление знаний методов организации и планирования исследований в области физики квантовых вычислений, включая способы решения задач с помощью современной аппаратуры и оборудования	Успешное и систематическое проявление знаний методов организации и планирования исследований в области физики квантовых вычислений, включая способы решения задач с помощью современной аппаратуры и оборудования
--	-------------------	--	--	--	---

10. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

Основная литература

1. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, 2001, 519 с.
2. А. Б. Болотин, Н. Ф. Степанов «Теория групп и ее применения в квантовой механике молекул». Вильнюс: «Элком», 1999.
3. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул: Учебное пособие.
4. Ростов-Дон: Феникс, 1997, 407 с.
5. В.Г. Цирельсон. «Квантовая химия. Молекулы, межмолекулярные системы и твердые тела.» М.: БИНОМ. 2010.
6. Р. Фларри Квантовая химия. М.: Мир, 1985.
7. И.Г. Каплан. «Межмолекулярные взаимодействия». М.: Бином. Лаборатория знаний.
8. 2012.

Дополнительная литература

9. Н.Ф. Степанов, В.И. Пупышев. «Квантовая механика молекул и квантовая химия». М.: изд-во МГУ, 1991.

10. Новаковская Ю. В. Молекулярные системы. Теория строения и взаимодействия с излучением. Части I, II и III. Москва. УРСС. 2004 г.
11. Дементьев А. И., С. О. Адамсон. Строение молекул и квантовая химия. Изд-во МФТИ. 2008
12. А.И. Ермаков. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Изд-во Юрайт. 2010.

11. Перечень ресурсов Интернет необходимых для освоения дисциплины:

- База данных Spectral Database for Organic Compounds (SDBS) - <http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs>
- База данных NIST Chemistry WebBook - <http://webbook.nist.gov/chemistry> База данных результатов квантовхимических расчетов Computed Property Data Base for Molecules (CPDB) - http://riodb.ibase.aist.go.jp/cpdb/index_e.html
- База данных химических сдвигов NmrShiftDB2 - <http://nmrshiftdb.nmr.uni-koeln.de>
- Программа Firefly - <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>
- Wikipedia (<https://www.wikipedia.org/>)

12. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Для освоения дисциплины необходимо посещение интерактивных занятий (лекций и семинаров) и регулярная самостоятельная работа в течение семестра.

13. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости):

- средства дистанционного сопровождения учебного процесса в форме сайта с избранными материалами лекций и семинарских занятий.
- лекции читаются с использованием современных мультимедийных возможностей и проекционного оборудования.

14. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

В соответствии с требованиями п. 5.3. образовательного стандарта МГУ по направлению подготовки «Физика». Любая аудитория, оснащенная проекционным оборудованием с возможностью подключения к ноутбуку, экраном, и учебной доской.