

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»  
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

И.о. декана химического факультета,  
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«30» августа 2019 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**  
**Квантовохимические расчёты в неорганической химии**

**Уровень высшего образования:**  
Магистратура

---

**Направление подготовки (специальность):**  
04.04.01 Химия

**Направленность (профиль) ОПОП:**  
Неорганическая химия

**Форма обучения:**  
очная

---

Рабочая программа рассмотрена и одобрена  
Учебно-методической комиссией факультета  
(протокол №3 от 13.05.2019)

Москва 2019

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки 04.04.01 «Химия» (программа магистратуры) в редакции приказа МГУ от 30 августа 2019 г., №1033.

Год (годы) приема на обучение 2019/2020, 2020/2021

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.
2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – индикатор - ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция	Индикатор достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
СПК-3.М Способен формулировать квантовохимические расчетные задачи для моделирования различных неорганических систем и выбирать параметры моделирования; владение навыками интерпретации получаемой квантовохимической информации	СПК-3.М.1 Грамотно оценивает качество квантовохимического моделирования неорганических систем	<b>Знать:</b> основные подходы к теоретическому моделированию химических систем различного типа, методы приближенного решения уравнения Шредингера, лежащие в основе различных квантовохимических методов, их основные достоинства и ограничения, пути анализа расчетных данных для получения химически значимой информации о строении и свойствах моделируемых объектов; <b>Владеть:</b> навыками интерпретации информации, получаемой в результате квантовохимического моделирования
	СПК-3.М.2 Проводит квантовохимическое моделирование неорганических систем	<b>Уметь:</b> формулировать конкретные расчетные задачи и методологически грамотно выбирать параметры моделирования в зависимости от типа химической системы; <b>Уметь:</b> ориентироваться в спектре доступных пакетов программ <b>Иметь опыт:</b> анализа квантовохимических данных, работы с тематическими источниками, выбора пути решения квантовохимических задач.

3. Объем дисциплины (модуля) составляет **2** зачетных единицы, всего **72** часа, из которых **48** часов составляет контактная работа студента с преподавателем (19 часов - занятия лекционного типа, 19 часов – занятия семинарского типа, 8 часов – индивидуальные консультации, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), **24** часа составляет самостоятельная работа студента.

4. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия. Требуется освоение дисциплин «Математический анализ», «Уравнения математической физики», «Основы квантовой механики», «Элементы строения вещества» в объеме, преподаваемом на Химическом факультете МГУ.

Обучающийся должен

**Знать:** основы математического анализа, дифференциальные уравнения, уравнения математической физики, основные операторы физических величин, основные подходы к описанию строения вещества.

**Уметь:** применять знания вышеуказанных разделов для описания химических объектов на атомно-молекулярном уровне.

**Владеть:** современными представлениями о строении атомов, молекул и твердых тел.

5. 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	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п..	Всего
Тема 1. Введение	2	2					2			
Тема 2. Теоретические основы: решение уравнения Шредингера	7	2	2		1		5	2		2
Тема 3. Методы учета электронной корреляции	5	2			1		3	2		2
Тема 4. Теория функционала плотности	9	3	3		1		7	2		2
Тема 5. Базисные наборы	8	3	2		1		6	2		2
Тема 6. Расчеты конечных систем	9	3	3		1		7	2		2
Тема 7. Расчеты бесконечных систем	9	3	3		1		7	2		2
Тема 8. Анализ результатов расчетов	7	1	3		1		5	2		2

Тема 9. Программное обеспечение	4		3		1		4			
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>	12					2	2			10
<b>Итого</b>	<b>72</b>	<b>19</b>	<b>19</b>		<b>8</b>	<b>2</b>	<b>48</b>			<b>24</b>

#### 6. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

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

Курс имеет электронную версию для презентации. Лекции читаются с использованием современных мультимедийных возможностей и проекционного оборудования. Занятия могут проходить на русском или английском языках. Для самоподготовки предлагается список вопросов по каждой теме, контрольные задания и перечень вопросов к экзамену.

#### 8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Со всех компьютеров МГУ организован доступ к полным текстам научных журналов и книг на русском и иностранных языках. Доступ открыт по IP-адресам, логин и пароль не требуются: <http://nbmgu.ru/>

#### Основная литература

1. Н.Ф. Степанов. Квантовая механика и квантовая химия. Москва. Мир / Изд-во МГУ. 2001
2. F. Jensen. Introduction to Computational Chemistry, 2nd Edition. Chichester John Wiley & Sons. 2007
3. В.И.Минкин, Б.Я.Симкин, Р.М.Миняев. Теория строения молекул, 2-е изд. Ростов-на-Дону. Феникс. 1997
4. Л. Цюликe. Квантовая химия, т.1. Москва. Мир. 1976
5. В.Г. Цирельсон. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. М: Бином, 2012.

#### Дополнительная литература

1. Р.Бейдер. Атомы в молекулах: квантовая теория. Москва. Мир . 2001
2. В.А.Губанов, Э.З.Курмаев, А.Л.Ивановский. Квантовая химия твердого тела. Москва. Наука. 1984
3. Р. Хоффман. Структура твердых тел и поверхностей - взгляд химика теоретика. Москва. Мир. 1990
4. C. Fiolhais, F. Nogueira, M. Marques. A Primer in Density Functional Theory. Springer-Verlag. New York. 2003

5. R.G. Parr, W. Yang. Density Functional Theory of Atoms and Molecules. Oxford University Press. Oxford. 1989
6. A.D. Becke, K. E. Edgecombe. A simple measure of electron localization in atomic and molecular systems. Melville. AIP Publishing. 1990. Journal of Chemical Physics. V.92. №9. p.5397
7. A. Savin. The electron localization function (ELF) and its relatives:interpretations and difficulties. Amsterdam. Elsevier. 2005. Journal of Molecular Structure: THEOCHEM. 727. p.127
8. M. Kohout. A Measure of Electron Localizability. Hoboken. Wiley Periodicals, Inc. 2004. International Journal of Quantum Chemistry 97. p.651
9. A.I. Baranov, M. Kohout. Electron Localization and Delocalization Indices for Solids. Hoboken. Wiley Periodicals, Inc. 2011. Journal of Computational Chemistry. 32. p.2064

### **Периодическая литература**

1. A.D. Becke, K. E. Edgecombe. A simple measure of electron localization in atomic and molecular systems. Melville AIP Publishing 1990 Journal of Chemical Physics 92 v/ 9 (p.5397)
2. A. Savin. The electron localization function (ELF) and its relatives:interpretations and difficulties. Amsterdam. Elsevier. 2005. Journal of Molecular Structure: THEOCHEM. v/ 727 (p.127)
3. M. Kohout. A Measure of Electron Localizability. Hoboken Wiley Periodicals, Inc. 2004 International Journal of Quantum Chemistry v. 97 (p.651)
4. A.I. Baranov, M. Kohout. Electron Localization and Delocalization Indices for Solids. Hoboken. Wiley Periodicals, Inc. 2011. Journal of Computational Chemistry v. 32 (p.2064)

- Материально-техническое обеспечение: специальных требований нет, занятия проводятся в обычной аудитории, оснащенной доской и мелом (маркерами)

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели: Кузнецов Алексей Николаевич, д.х.н., ведущий научный сотрудник

### **Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения**

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета. На зачете проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

### **Вопросы для самостоятельной работы и подготовки к экзамену:**

#### **1. Теоретические основы квантовой химии**

Классификация методов «компьютерной химии». Молекулярная механика (методы силового поля) и методы электронной структуры (квантовая химия). Сравнительный анализ достоинств и недостатков соответствующих групп методов. Принципы моделирования химических объектов в молекулярной механике и методах электронной структуры. Гамильтониан многоэлектронной системы. Стационарное уравнение Шредингера. Адиабатическое приближение и приближение Борна-Оппенгеймера. Одноэлектронное приближение (Хартри). Метод МО-ЛКАО. Определитель Слейтера. Метод Хартри-Фока. Самосогласованное поле и самосогласованные орбитали. Полуэмпирические методы, общие принципы и классификация. Нулевое дифференциальное перекрытие. Методы ПДП, ЧПДП, ППДП. Метод Хюккеля, расширенный метод Хюккеля.

Природа электронной корреляции, кулоновская дыра и дыра Ферми. Статическая и динамическая корреляция. Методы учета электронной корреляции: конфигурационные взаимодействия, многочастичная теория возмущений Меллера-Плессета, метод взаимодействующего (парного) кластера. Сравнение производительности различных методов учета электронной корреляции.

Теория функционала электронной плотности (DFT). Теорема Хоэнберга-Кона. Уравнения Кона-Шэма. Обменно-корреляционный функционал. Основные типы функционалов. Локальные и нелокальные методы, основные схемы параметризации. Приближение локальной (LDA) и локальной спиновой плотности (LSDA), типовые функционалы, производительность и ограничения. Приближение обобщенного градиента (GGA), основы метода и типовые функционалы, преимущества по сравнению с LDA. Понятие о Meta-GGA. Гибридные функционалы. Сравнительная производительность разных обменно-корреляционных функционалов.

## **2. Базисные наборы в квантовохимических расчетах**

Понятие «базиса» в квантовохимических расчетах. Классификация базисных наборов, типы функций, используемых в базисных наборах. Слейтеровы и гауссовы орбитали. Минимальные и расширенные базисы. Базисы по Поплу, номенклатура. Диффузные и поляризационные базисные функции. Ошибки суперпозиции базисов, методы их устранения. Эффективные ядерные потенциалы и базисы для них.

## **3. Расчеты конечных и периодических систем**

Поверхность потенциальной энергии (ППЭ). Топология и стационарные точки ППЭ. Оптимизация геометрии конечных объектов. Сравнительный анализ алгоритмов поиска стационарных точек. Проблема глобального минимума. Алгоритмы поиска глобального минимума.

Теория переходного состояния. Расчеты термодинамических и кинетических параметров молекулярных систем. Континуальные, дискретные и гибридные модели учета влияния среды. Молекулярные свойства как производные энергии.

Проблема квантовохимического описания твердого тела. Способы представления кристаллов. Модель идеального кристалла и кластерная модель твердого тела. Трансляционная симметрия кристалла. Теорема Блоха. Энергетический спектр кристалла в зонной модели. Основные методы расчета электронной структуры идеального кристалла: расширенный метод Хюккеля, методы Хартри-Фока и DFT. Методы локализованных маффин-тин орбиталей (LMTO) и плоских волн (PW). Присоединенные плоские волны (APW). Проблема точности в расчетах свойств твердых тел. Расчеты проводимости, магнитных свойств, механических свойств твердых тел. Колебательные и резонансные спектры кристаллов. Расчет фотоэлектронных спектров. Теоретические карты распределения электронной плотности. Фононные колебания в расчетах твердого тела.

#### 4. Анализ волновой функции.

Одноэлектронные свойства в методе Хартри-Фока и DFT. Анализ химической связи в рамках теории MO. Реконструкционный анализ, граничные орбитали. Проблемы фрагментного анализа многоэлектронных систем. Сравнительный анализ различных схемы вычисления зарядов на атомах. Понятие атома в молекуле согласно теории Бэйдера (AIM), топология электронной плотности. Классификация особых точек. Понятие квантовой подсистемы атома в молекуле и его характеристики.

Способы визуализации электронной плотности. Электронная плотность и ее «производные», разностная плотность. Функция электронной локализации (ELF). Ее определение для метода Хартри-Фока и DFT. Индикатор электронной локализуемости (ELI). Определение ELI, сходство и отличие от ELF.

#### 5. Программное обеспечение квантовохимических расчетов.

Сравнительная характеристика основных пакетов для молекулярных расчетов. Сравнительная характеристика основных пакетов для расчетов электронной структуры бесконечных (периодических) систем. Особенности пакета DGrid в сравнении с типовыми многофункциональными пакетами.

#### Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

<b>ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>				
Оценка \ Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

<b>РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>	<b>ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ</b>
Знать: основные подходы к теоретическому моделированию химических систем различного типа, методы приближенного решения уравнения Шредингера, лежащие в основе различных кван-	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзаме-

товохимических методов, их основные достоинства и ограничения, пути анализа расчетных данных для получения химически значимой информации о строении и свойствах моделируемых объектов	не
Уметь: формулировать конкретные расчетные задачи и методологически грамотно выбирать параметры моделирования в зависимости от типа химической системы;	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене
Владеть: навыками интерпретации информации, получаемой в результате квантовохимического моделирования; ориентироваться в спектре доступных пакетов программ; Иметь опыт: анализа квантовохимических данных, работы с тематическими источниками, выбора пути решения квантовохимических задач.	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене