Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение

высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет» (Новосибирский государственный университет, НГУ)

Факультет естественных наук

Согласовано

Декан ФЕН

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_Резников В.А..

*подпись*

«\_\_\_» \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 20\_\_\_ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**Введение в расчетные методы в химии, химической физике и материаловедении**

направление подготовки: 04.04.01 Химия

направленность (профиль): Химия

Форма обучения: очная

Разработчик:

к.х.н. Рычков Д.А. \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Зав. каф. физической химии

академик РАН, д.х.н., проф. Пармон В.Н. \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Руководитель программы:

чл.-корр. РАН, проф. Нетесов С.В. \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Новосибирск, 2020

**Содержание**

[1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы 3](#_Toc21097778)

[2. Место дисциплины в структуре образовательной программы 4](#_Toc21097779)

[3. Трудоемкость дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающегося 4](#_Toc21097780)

[4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий 5](#_Toc21097781)

[5. Перечень учебной литературы 6](#_Toc21097782)

[6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся 6](#_Toc21097783)

[7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины 6](#_Toc21097784)

[8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине 7](#_Toc21097785)

[9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине 7](#_Toc21097786)

[10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине 8](#_Toc21097787)

Приложение 1 Аннотация по дисциплине

Приложение 2 Оценочные средства по дисциплине

# Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

| Результаты освоения образовательной программы(компетенции) | Индикаторы | Результаты обучения по дисциплине |
| --- | --- | --- |
| **М-ОПК-1**. Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения | **М-ОПК-1.3**. Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач | - имеет представление о современных программах, реализующих расчетные методы, используемые в химии, химической физике и материаловедении |
| **М-ОПК-3**. Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности | **М-ОПК-3.1.** Использует современные IT-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля | - владеет методами расчета и анализа физико-химических свойств молекул и материалов для молекулярных и неорганических систем |
| **М-ПК-5.** Способен выбирать обоснованные подходы к анализу связи структура-свойство и к конструированию веществ и материалов c заданными химическими, физическими, физико-химическими свойствами и/или биологической активностью | **М-ПК-5.1.** Применяет знания о химических, физических, физико-химических свойствах и биологической активности известных веществ и материалов при анализе соотношения «структура-свойство» | - имеет представление о методах моделирования новых систем на основе аналогичных структур |
| **М-ПК-5.2.** Проводит анализ закономерностей «структура – свойство» в рядах известных аналогов, выявляет корреляции «структура – свойство» | - владеет основами выбора стратегии поиска структурных прототипов новых веществ и материалов на основе фундаментальных знаний физической химии и расчетных методов |
| **М-ПК-5.3.** Вырабатывает стратегию поиска структурных прототипов новых веществ и материалов с заданными свойствами с учетом требований к их структуре и возможных ограничений | - имеет представление о современных программах, реализующих расчетные методы, используемые в химии, химической физике и материаловедении |

# 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплины (практики), изучение которых необходимо для освоения дисциплины *Введение в расчетные методы в химии, химической физике и материаловедении*: физика, физическая химия, неорганическая химия, органическая химия, строение вещества, химия твердого тела.

Дисциплины (практики), для изучения которых необходимо освоение дисциплины *Введение в расчетные методы в химии, химической физике и материаловедении*: производственная практика, научно-исследовательская работа, итоговая государственная аттестация.

# 3. Трудоемкость дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающегося

Трудоемкость дисциплины – 2 з.е. (72 ч)

Форма промежуточной аттестации: 3 семестр – дифференцированный зачет

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| № | Вид деятельности | Семестр |
| 3 |
| 1 | Лекции, ч | 22 |
| 2 | Практические занятия, ч | 22 |
| 3 | Лабораторные занятия, ч |  |
| 4 | Занятия в контактной форме, чиз них | 46 |
| 5 | из них аудиторных занятий, ч | 44 |
| 6 | групповая работа с преподавателем, ч | - |
| 7 | консультаций, час. | - |
| 8 | промежуточная аттестация, ч | 2 |
| 9 | Самостоятельная работа, час.  | 26 |
| 10 | Всего, ч | 72 |

Реализация дисциплины включена в практическую подготовку в ИХТТМ СО РАН при проведении следующих видов занятий, часть из которых предусматривает участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью:

- лекции;

- практические занятия.

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

***3 семестр***

Лекции (22 ч)

|  |  |
| --- | --- |
| Наименование темы и их содержание | Объем,час |
| Определение расчетных методов. Различия в подходах квантово-химических и классических методов. Описание системы. Основополагающие силы. Динамические уравнения. Решение динамических уравнений. Алгоритм Верле. Разделение переменных. Приближение Борна-Оппенгеймера. Приближение Хартри-Фока. Применение приближений на простых системах. | 4 |
| Метод полей сил в статических расчетах. Выбор частиц, стартовых условий, Взаимодействий и динамических уравнений. Энергия, разложение на вклады. Энергия растяжения связей. Разложение в ряд Тейлора. Потенциал Морзе. Различие между равновесной и оптимальной длинной связи. Энергия угловой связи. Разложение в ряд Тейлора. Энергия торсионного кручения. Разложение в ряд Фурье. Связь с энергией ВДВ взаимодействий. | 2 |
| ВДВ взаимодействия. Дисперсионные силы. Силы отталкивания. Потенциал Ленарда-Джонса, Морзе, Хилла. Водородные связи. Влияние анизотропии. Использование квантово-химических подходов для описания электронной плотности. | 2 |
| Энергия электростатических взаимодействий. Расчет полярных молекул. Расчет зарядов на атомах. Функция минимизации ошибки. Кросс-термы. Взаимовлияние различных термов. | 2 |
| Сравнение энергий для разных веществ. Параметризация полей сил. Поля сил для разных классов веществ. Различия между полями сил. | 2 |
| Методы электронной структуры. Уравнение Шредингера. Уравнение Хартри-Фока. Приближение Борна-Оппенгеймера. Полуэмпирические методы. | 2 |
| Теория функционала плотности. Теория самосогласующегося поля. Механизм оптимизации. | 2 |
| Основные методы расчета, функционалы и базисные наборы. Особенности выбора уровня теории. | 2 |
| Алгоритмы оптимизации. Расчет основных состояний. Влияние стартовых координат на результат оптимизации. | 2 |
| Введение в расчеты кристаллических веществ. | 2 |

Практические занятия (22 ч)

|  |  |
| --- | --- |
| Содержание практического занятия | Объем, час |
| Практическое занятие в пакете AA-CLP. Расчет энергии незаряженных молекул в кристалле | 4 |
| Практическое занятие в пакете AA-CLP. Расчет энергии заряженных молекул в кристалле | 2 |
| Практическое занятие в пакете AA-CLP. Минимизация энергии. Расчет энергии димеров. | 2 |
| Практическое занятие в модуле PIXEL. Расчет энергии кристаллов  | 2 |
| Практическое занятие в Mercury, CE17. Расчет энергий для различных веществ. Сравнение энергий. | 4 |
| Практическое занятие по расчету конформации органической молекулы квантово-химическими алгоритмами. Конструирование стартовых геометрий. | 4 |
| Расчет колебательного спектра, спектра УФ, ЯМР. Анализ полученных результатов. | 4 |

Самостоятельная работа студентов (26 ч)

|  |  |
| --- | --- |
| Перечень занятий на СРС | Объем, час |
| Закрепление, обобщение и повторение пройденного учебного материала | 6 |
| Уточнение и дополнение сведений и знаний, полученных на лекциях | 4 |
| Выполнение домашнего задания | 4 |
| Изучение теоретического материала, не освещаемого на лекциях | 2 |
| Подготовка к дифференцированному зачету | 10 |

# 5. Перечень учебной литературы

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика. — Издание 5-е, стереотипное. — М.: Физматлит, 2004. — 224 с. — («Теоретическая физика», том I). — ISBN 5-9221-0055-6.
2. Ландау, Л. Д., Лифшиц, Е. М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). — Издание 6-е, исправленное. — М.: Физматлит, 2004. — 800 с. — («Теоретическая физика», том III). — ISBN 5-9221-0530-2.
3. Jensen F. Introduction to Computational Chemistry // Design. 2nd ed. Wiley, 2007. Vol. 2. 624 p.
4. J. B. Foresman and Æ Frisch, Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, 3rd ed., Gaussian, Inc.: Wallingford, CT, 2015.
5. ISBN: 978-1-935522-03-4
6. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия: молекулы, молекулярные системы и твердые тела / В.Г. Цирельсон. – 4-е изд. (эл.). – Москва : Лаборатория знаний, 2017. – 522 с. : ил., табл., схем. – (Учебник для высшей школы).

# 6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся

1. Сатанин А.М. Введение в теорию функционала плотности. Учебно-методическое пособие. Нижний Новгород, 2009, 64 с
2. Квантовая химия на ПК: Компьютерное моделирование молекулярных систем : учеб.-метод. пособие / В. Б. Кобычев. – Иркутск: Иркут. гос. ун-т, 2006. 87 с.

# 7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

***7.1 Ресурсы сети Интернет***

Освоение дисциплины используются следующие ресурсы:

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);

- образовательные интернет-порталы;

- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.

Взаимодействие обучающегося с преподавателем (синхронное и (или) асинхронное) осуществляется через личный кабинет студента в ЭИОС, электронную почту, социальные сети.

***7.2 Современные профессиональные базы данных:***

- Реферативно-библиографическая база данных The Cambridge Structural Database (CSD)

- Реферативно-библиографическая база данных Scopus (Elsevier)

- Реферативно-библиографическая база данных Scifinder (Chemical Abstracts Service)

- Библиометрическая база данных Web of Science Core Collection (Thomson Reuters Scientific LLC.)

# 8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

***8.1 Перечень программного обеспечения***

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

Также используются программы AA-CLP, CrystalExplorer17, Gaussian16 (на суперкомпьютере НГУ), Chemcraft Lite.

***8.2 Информационные справочные системы***

Не используются.

# 9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Для реализации дисциплины используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной аттестации;

2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся;

3. ПК или ноутбук c ОС Windows.

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется согласно «Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете».

# 10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Перечень результатов обучения по дисциплине *Введение в расчетные методы в химии, химической физике и материаловедении* и индикаторов их достижения представлен в разделе 1.

***10.1 Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине***

***Текущий контроль успеваемости:***

В течение семестра преподаватель контролирует посещаемость, оценивает уровень подготовки студента к каждому занятию в коллективном обсуждении тем, рассматриваемых в рамках курса, проверяет выполнение домашнего задания.

***Промежуточная аттестация:***

Итоговую оценку за семестр студент получает, сдавая дифференцированный зачет в устной форме.

***Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине Введение в расчетные методы в химии, химической физике и материаловедении***

Таблица 10.1

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Код компетенции** | **Индикатор** | **Результат обучения по дисциплине** | **Оценочное средство** |
| **М-ОПК-1** | **М-ОПК-1.3**. Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач | - имеет представление о современных программах, реализующих расчетные методы, используемые в химии, химической физике и материаловедении | дифференциро-ванный зачет |
| **М-ОПК-3** | **М-ОПК-3.1.** Использует современные IT-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля | - владеет методами расчета и анализа физико-химических свойств молекул и материалов для молекулярных и неорганических систем | дифференциро-ванный зачет |
| **М-ПК-5**  | **М-ПК-5.1.** Применяет знания о химических, физических, физико-химических свойствах и биологической активности известных веществ и материалов при анализе соотношения «структура-свойство» | - имеет представление о методах моделирования новых систем на основе аналогичных структур | дифференциро-ванный зачет |
| **М-ПК-5.2.** Проводит анализ закономерностей «структура – свойство» в рядах известных аналогов, выявляет корреляции «структура – свойство» | - владеет основами выбора стратегии поиска структурных прототипов новых веществ и материалов на основе фундаментальных знаний физической химии и расчетных методов | дифференциро-ванный зачет |
| **М-ПК-5.3.** Вырабатывает стратегию поиска структурных прототипов новых веществ и материалов с заданными свойствами с учетом требований к их структуре и возможных ограничений. | - имеет представление о современных программах, реализующих расчетные методы, используемые в химии, химической физике и материаловедении | дифференциро-ванный зачет |

Таблица 10.2

|  |  |
| --- | --- |
| **Критерии оценивания результатов обучения** | **Шкала****оценивания** |
| **Дифференцированный зачет:**–  наличие полных ответов на все вопросы с непринципиальными неточностями,– осмысленность, структурированность, логичность и аргументированность ответов, – точность и корректность применения терминов и понятий,– наличие исчерпывающих ответов на дополнительные вопросы. | *Отлично* |
| **Дифференцированный зачет:** –  наличие полных ответов на все вопросы с несущественными ошибками,– осмысленность, структурированность, логичность и аргументированность ответов, наличие затруднений в объяснении отдельных процессов и явлений, – точность и корректность применения терминов и понятий при наличии незначительных ошибок,– наличие полных ответов на дополнительные вопросы с возможным присутствием ошибок. | *Хорошо* |
| **Дифференцированный зачет:** –  наличие ответов на все вопросы, часть из которых неполные и/или с существенными ошибками,– осмысленность и структурированность в изложении материала, наличие ошибок в логике, аргументации и объяснении отдельных процессов и явлений, – корректность применения терминов и понятий при наличии незначительных ошибок,– наличие неполных и/или содержащих существенные ошибки ответов на дополнительные вопросы. | *Удовлетворительно* |
| **Дифференцированный зачет:** –  наличие ответов не на все вопросы, часть из которых неполные и/или с существенными ошибками,– отсутствие осмысленности, структурированности, логичности и аргументированности в изложении материала, –  грубые ошибки в применении терминов и понятий,– отсутствие ответов на дополнительные вопросы. | *Неудовлетворительно* |

***Типовые контрольные задания и иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения***

1. Определение понятия расчетных методов. Основные сложности проведения исследований расчетными методами и методы их решения.
2. Общее описание квантово-химических методов и методов классической механики. Описание системы. Основополагающие силы. Динамические уравнения.
3. Решение динамических уравнений. Алгоритм Верле.
4. Разделение переменных. Приближение Борна-Оппенгеймера. Приближение Хартри-Фока. Применение приближений на простых системах.
5. Метод полей сил в статических расчетах. Выбор частиц, стартовых условий, взаимодействий и динамических уравнений.
6. Полная энергия поля сил. Энергия растяжения связей. Разложение в ряд Тейлора. Потенциал Морзе. Различие между равновесной и оптимальной длинной связи. Энергия угловой связи. Разложение в ряд Тейлора.
7. Энергия торсионного кручения. Разложение в ряд Фурье. Связь с энергией ВДВ взаимодействий.
8. ВДВ взаимодействия. Дисперсионные силы. Силы отталкивания. Потенциал Ленарда-Джонса, Морзе, Хилла. Водородные связи. Влияние анизотропии.
9. Использование квантово-химических подходов для описания электронной плотности.
10. Энергия электростатических взаимодействий. Расчет полярных молекул. Расчет зарядов на атомах.
11. Функция минимизации ошибки. Кросс-термы. Взаимовлияние различных термов.
12. Сравнение энергий для разных веществ. Параметризация полей сил. Поля сил для разных классов веществ. Различия между полями сил.
13. Методы электронной структуры. Уравнение Шредингера. Уравнение Хартри-Фока. Приближение Борна-Оппенгеймера. Полуэмпирические методы.
14. Теория функционала плотности. Теория самосогласующегося поля. Механизм оптимизации.
15. Основные методы расчета, функционалы и базисные наборы. Особенности выбора уровня теории.
16. Алгоритмы оптимизации. Расчет основных состояний. Влияние стартовых координат на результат оптимизации.

Оценочные материалы по промежуточной аттестации (приложение 2), предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям ФГОС, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.

Студентам предлагается провести расчеты методами классческой механики для кристалличсеких систем и для отдельной молекулы в газовой фазе с использованием современного ПО; сравнить данные полученные в разных программах и сравнить их.

**Лист актуализации рабочей программы дисциплины**

**«Введение в расчетные методы в химии, химической физике и материаловедении»**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| № | Характеристика внесенныхизменений (с указанием пунктов документа) | Дата и № протокола Ученого совета ФЕН | Подписьответственного |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |