

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего
профессионального образования
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Факультет биоинженерии и биоинформатики

УТВЕРЖДАЮ

Декан
факультета биоинженерии
и биоинформатики,
академик

_____/В.П. Скулачев /

« ____ » _____ 20__ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование дисциплины:

Квантовая химия и строение молекул

Уровень высшего образования:

специалитет

Направление подготовки (специальность):

06.05.01 Биоинженерия и биоинформатика

Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена

Ученым советом факультета

(протокол № _____, _____)

Москва 20__

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по специальности 06.05.01 «Биоинженерия и биоинформатика» (программы специалитета) в редакции приказа МГУ от 30 декабря 2016 г.

Год (годы) приема на обучение – 2016, 2017, 2018, 2019.

© Факультет биоинженерии и биоинформатики МГУ имени М.В. Ломоносова

Программа не может быть использована другими подразделениями университета и другими вузами без разрешения факультета.

Цель и задачи дисциплины

Цель курса: изучить основные приближения, применяемые при описании электронного строения молекулярных систем.

Задачи курса: выработать понимание условий и особенностей применения различных приближений при описании основного и возбужденных электронных состояний молекулярных систем и умение самостоятельно решать задачи в наиболее простых приближениях и интерпретировать полученные результаты.

1. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО: вариативная часть, профессиональный цикл, курс по выбору, курс IV – семестр 8.

2. Входные требования для освоения дисциплины, предварительные условия (если есть):

Знание таких дисциплин, как «Линейная алгебра», «Математический анализ», «Теория вероятностей», «Физика».

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине:

Знать: основные постулаты квантовой механики; условия выделения уравнений, определяющих стационарные состояния электронной и ядерной подсистем молекул; условия разделения различных видов движения ядер (поступательное, вращательное, колебательное); основы аппроксимации энергии молекулярных систем при использовании силовых полей; основы одноэлектронного приближения и способы уточнения описания электронного состояния молекул; основы полуэмпирических методов; основы метода функционала плотности; основы комбинированного квантово-классического подхода к описанию больших систем.

Уметь: анализировать путь реакции на основании построения сечений поверхностей потенциальной энергии; решать задачу о колебаниях молекулярных систем в гармоническом приближении; находить координаты, определяющие внутреннее вращение в молекулах; решать задачу о состояниях одноэлектронного атома; применять метод Хюккеля для оценки вида и энергий π -орбиталей сопряженных углеводородов.

Владеть: навыками построения функций радиального распределения электронной плотности; построения определителей, описывающих заданные электронные конфигурации молекулярных систем; конструирования набора определителей, позволяющих аппроксимировать основное и возбужденные состояния молекул разной мультиплетности; формирования набора внутренних переменных (Z -матрицы).

Иметь опыт: анализа распределения электронной плотности многоатомных систем в рамках подхода Малликена; решения задачи о состоянии π -электронной подсистемы сопряженных углеводородов; оценки реакционной способности молекул на основании анализа их граничных орбиталей.

4. Формат обучения – лекционные и семинарские занятия.

5. Объем дисциплины составляет 3 з.е., в том числе 64 академических часов, отведенных на контактную работу обучающихся с преподавателем, 44 академических часа на самостоятельную работу обучающихся.

6. Краткое содержание дисциплины (аннотация):

1. Основные постулаты квантовой механики. Уравнение Шредингера («качественный вывод»), постулаты о существовании волновой функции, об измеряемых величинах, о среднем. Принцип неопределенности, принцип суперпозиции, принцип соответствия. Временное и стационарное уравнения Шредингера

2. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. ППЭ. Выделение электронной и ядерной подзадач, адиабатическое приближение и приближение Борна-Оппенгеймера. Электронные и ядерные функции. Основное и возбужденные состояния молекулярных систем.

3. Движение по ППЭ: минимумы, седловые точки. Понятие о координате реакции (Z -матрица). Анализ пути реакции на примерах конкретных реакций.

4. Выделение различных типов движений. Отделение поступательного движения, разделения колебаний и вращений, условия Экарта, их физический смысл.

5. Колебания молекул. Внутренние и нормальные координаты. Нормальные колебания. Внутренние вращения.

- 6. Молекулярная механика.** Аппроксимация потенциальной энергии. Силовые поля. Молекулярно-механическое описание молекул. Теорема Гельмана-Фейнмана. Метод молекулярной динамики.
- 7. Одноэлектронное приближение.** Принцип тождественности и принцип Паули. Определитель Слейтера. Электронная плотность молекулы. Спин, операторы спина, собственные функции и значения операторов S^2 и S_z , спиновая и пространственная части одноэлектронной функции.
- 8. Метод Хартри-Фока.** Фокиан, кулоновские и обменные операторы. Канонические уравнения Х.-Ф., канонические орбитали. Орбитальные энергии, их связь с полной электронной энергией.
- 9. Метод МОЛКАО.** Уравнения Хартри-Фока для пространственных орбиталей. Уравнения Хартри-Фока-Рутана, схема ССП. Базисы атомных орбиталей. Орбитали слейтерова и гауссова типа. Сжатие базисов.
- 10. Анализ распределения электронной плотности** в терминах заселенностей и зарядов атомов: схема Малликена, Бейдера. Молекулярные орбитали ряда молекул в минимальном базисе
- 11. Метод КВ.** Теорема Бриллюэна. Конфигурационные функции состояния. Варианты метода КВ: КВ1, КВ1+2, полное КВ. Примеры.
- 12. Полуэмпирические методы.** Валентное приближение. Приближение НДП. Расширенный метод Хюккеля как несамосогласованный вариант полуэмпирических методов. Сопряженные углеводороды. π -электронное приближение и метод Хюккеля. Анализ распределения электронной плотности в рамках схемы Коулсона. Реакционная способность молекул.
- 13. Метод функционала плотности.** Основы метода функционала плотности. Теорема Хоэнберга-Кона. Идея Кона и Шэма. Обменно-корреляционная энергия.
- 14. Комбинированное квантово-классическое описание молекулярной системы (QM/MM).** Варианты соединения квантовой и классической подсистем: атом-связка (link atom) и пограничный атом (connection atom). Варианты включения квантовой подсистемы в молекулярно-механическую: механическое, электронное и электронное с учетом поляризации.

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) Виды контактной работы, часы			Самостоятельная работа обучающегося, часы (виды самостоятельной работы – эссе, реферат, контрольная работа и пр. – указываются при необходимости)
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Всего	
Тема 1. Основные постулаты квантовой механики	10	4	2	6	4
Тема 2. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Поверхность потенциальной энергии (ППЭ)	6	2	2	4	2
Тема 3. Движение по ППЭ	6	2	2	4	2

Тема 4. Выделение различных типов движений	6	2	2	4	2
Тема 5. Колебания молекул	7	2	2	4	3
Тема 6. Молекулярная механика	7	2	2	4	3
Тема 7. Одноэлектронное приближение.	7	2	2	4	3
Тема 8. Метод Хартри-Фока.	6	2	2	4	2
Тема 9. Метод МО ЛКАО	12	4	4	8	4
Тема 10. Анализ распределения электронной плотности	6	2	2	4	2
Тема 11. Метод конфигурационного взаимодействия	8	2	2	4	4
Тема 12. Полуэмпирические методы.	10	2	4	6	4
Тема 13. Метод функционала плотности	8	2	2	4	4
Тема 14. Комбинированное квантово-классическое описание молекулярной системы (QM/MM)	7	2	2	4	3
Промежуточная аттестация – зачет (указывается форма проведения)					2 (количество часов, отведенных на промежуточную аттестацию)
Итого	108	64		44	

7. Фонд оценочных средств (ФОС) для оценивания результатов обучения по дисциплине

7.1. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения текущего контроля успеваемости.

- (1) Записать гамильтониан для предложенной молекулы.
- (2) Предложить набор внутренних координат для заданной молекулы.
- (3) Схематично изобразить волновые функции, которые будут являться решением одномерного уравнения Шредингера при заданном потенциале в зависимости от энергии частицы. Записать граничные условия (без решения).
- (4) Определить возможные спиновые состояния системы, состоящей из заданного числа электронов, и составить определитель Слейтера для предложенного спинового состояния системы.
- (5) Предложить простейшую аппроксимацию потенциала, описывающего вращение функциональных групп в заданной молекуле.

7.2. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения промежуточной аттестации.

- (1) Каковы основные допущения одноэлектронного приближения и границы его применимости? Выписать выражение для электронной энергии предложенной трехатомной молекулы, состояние которой описывает определитель, построенный в приближении ограниченного метода Хартри-Фока.
- (2) В чем суть адиабатического приближения и приближения Борна-Оппенгеймера? Охарактеризовать качественный вид решения задачи о состоянии частицы в заданном потенциале.
- (3) Каковы условия отделения поступательного движения и разделения колебаний и вращений? Сформулировать условия Экарта и пояснить их физический смысл. Объяснить решение задачи о гармоническом осцилляторе: уровни энергии и собственные функции.

(4) Какие есть способы построения набора независимых переменных, задающих конфигурацию ядерной подсистемы молекулы. Выписать в общем виде колебательный гамильтониан предложенной молекулы, используя нормальные координаты, и общее выражение энергии ее колебательных состояний.

(5) Из каких функций обычно состоят базисные наборы, используемые для описания электронного состояния молекул? Охарактеризовать логику решения задачи об основном и низших возбужденных состояниях предложенной малоатомной молекулы.

Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине.

Результаты обучения	«Неудовлетворительно»	«Удовлетворительно»	«Хорошо»	«Отлично»
Знание основных постулатов квантовой механики; условий выделения уравнений, определяющих стационарные состояния электронной и ядерной подсистем молекул; условия разделения различных видов движения ядер (поступательное, вращательное, колебательное); основы аппроксимации энергии молекулярных систем при использовании силовых полей; основы одноэлектронного приближения и способы уточнения описания электронного состояния молекул; основы полуэмпирических методов; основы метода функционала плотности; основы комбинированного квантово-классического	Знания отсутствуют	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания

подхода к описанию больших систем.				
Умение: - анализировать путь реакции на основании построения сечений поверхностей потенциальной энергии; - решать задачу о колебаниях молекулярных систем в гармоническом приближении; находить координаты, определяющие внутреннее вращение в молекулах; - решать задачу о состояниях одноэлектронного атома; применять метод Хюккеля для оценки вида и энергий π -орбиталей сопряженных углеводородов.	Умения отсутствуют	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности не принципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Владение: навыками построения функций радиального распределения электронной плотности; построения определителей, описывающих заданные электронные конфигурации молекулярных систем; конструирования набора определителей, позволяющих	Навыки владения отсутствуют	Наличие отдельных навыков (наличие фрагментарного опыта)	В целом, сформированные навыки (владения), но используемые не в активной форме	Сформированные навыки (владения), применяемые при решении задач

аппроксимировать основное и возбужденные состояния молекул разной мультиплетности; формирования набора внутренних переменных (Z- матрицы).				
---	--	--	--	--

8. Ресурсное обеспечение:

Перечень основной и дополнительной литературы

1. Основная литература:

1. Н. Ф. Степанов. «Квантовая механика и квантовая химия». Москва: МИР, Изд. МГУ, 2001. 519 с.
2. Ю.В. Новаковская. «Молекулярные системы. Теория строения и взаимодействия с излучением». Часть I (Общие основы квантовой механики и теории симметрии). Москва: УРСС, 2004, 102 с. Часть II (Квантовые состояния молекул). Москва: УРСС, 2004, 173 с.

Дополнительная литература:

1. Р. Фларри. «Квантовая химия». Москва: Мир, 1985. 472 с.
2. В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. «Теория строения молекул». Ростов-Дон: Феникс, 1997, 407 с.
3. С. Фудзинага. «Метод молекулярных орбиталей». Москва: Мир 1983. 461 с.
4. У. Флайгер, «Строение и динамика молекул», том 1. Москва: Мир 1982. 407 с.
 - Перечень лицензионного программного обеспечения (при необходимости)
 - Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем
 - Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (при необходимости)

Электронная библиотека МГУ <http://www.nbmgu.ru/publicdb/>

Google Академия <https://scholar.google.com/>

Описание материально-технического обеспечения.

Лекции и семинары с использованием мультимедийных презентаций.