

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

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
акад. РАН, профессор



/В.В. Лунин/

«14» июня 2015 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

**Теоретические методы исследования неорганических веществ и
материалов**

Уровень высшего образования:
Подготовка кадров высшей квалификации

Направление подготовки (специальность):

04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) ОПОП:

Химия твердого тела 02.00.21

Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №4 от 03.06.2015)

Москва 2015

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки» на основе Образовательного стандарта, самостоятельно установленного МГУ имени М.В.Ломоносова (далее – ОС МГУ), утвержденного Приказом № 552 от 23.06.2014 г. по МГУ с учетом изменений в ОС МГУ, внесенных Приказом №831 по МГУ от 31.08.2015 г..

Год (годы) приема на обучение 2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018,
2018/2019, 2019/ 2020

1. Наименование дисциплины (модуля): **Теоретические методы исследования неорганических веществ и материалов**

Краткая аннотация: «*Теоретические методы исследования неорганических веществ и материалов*» является вариативной дисциплиной для научно-квалификационных работ при подготовке научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки кадров высшей квалификации 04.06.01 Химические науки и посвящена изложению основ методов теоретического исследования химических соединений и процессов, преимущественно на базе квантовомеханических расчетов, которые находят все большее применение в современной неорганической химии и химии твердого тела. Основное внимание уделяется возможностям теоретического моделирования, физическим принципам и модельным приближениям, которые лежат в основе методов, используемых при исследовании вещества в газообразном и конденсированном (растворы, твердые кристаллические тела) состоянии. Дается представление о типах решаемых проблем и подходах к их решению в зависимости от вида исследуемых соединений. Также в рамках курса рассматриваются некоторые практические аспекты квантовохимического моделирования и делается обзор наиболее широко применяемых программных пакетов. Курс рассчитан на слушателей, обладающих уровнем подготовки специалистов Химического факультета МГУ со специализацией в области неорганической химии, или аспирантов начального этапа обучения, планирующих подготовку и защиту научно-квалификационных работ по специальности ВАК 02.00.01-неорганическая химия или 02.00.21-химия твердого тела.

2. Уровень высшего образования– подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре

3. Направление подготовки: 04.06.01 Химические науки. Направленности (профили) Химия твердого тела

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок 1 «Дисциплины (модули)».

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Компетенция	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
-------------	--

<p>СПК-2: Способен выполнять комплексное исследование общих и функциональных свойств твердотельных материалов с использованием современных физико-химических методов; интерпретировать и анализировать результаты исследований</p>	<p>Знать: методы решения уравнения Шредингера. Знать: методы учета электронной корреляции Уметь: анализировать данные, полученные при квантовохимическом моделировании Владеть: навыками моделирования электронной структуры молекулярных объектов Владеть: навыками моделирования электронной структуры периодических систем</p>
---	--

6. Объем дисциплины (модуля) 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:

Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетные единицы, всего 108 часов, из которых 38 часа составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (26 часов занятия лекционного типа, 6 часов консультаций (индивидуальных и групповых), 6 часов мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации), 70 часов составляет самостоятельная работа учащегося.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

В специалитете или магистратуре должны быть освоены курсы «Неорганическая химия», «Математический анализ», «Физика», «Уравнения математической физики», «Квантовая химия», «Элементы строения вещества».

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

<p>Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттеста-</p>	<p>Всего (часы)</p>	<p>В том числе</p>	
		<p>Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них</p>	<p>Самостоятельная работа обучающегося, часы из них</p>

		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. П.	Всего
Раздел 1. Введение Содержание раздела: Задачи теоретического моделирования объектов в современной химии. Классификация объектов, классификация методов моделирования в зависимости от свойств объектов и уровня их описания.	6	2	-	-	-	-	2	4	-	4
Раздел 2. Квантовая химия: методы решения уравнения Шредингера. Содержание раздела: Стационарное уравнение Шредингера. Адиабатическое приближение и приближение Борна-Оппенгеймера, их применимость. Одноэлектронное приближение, спин-орбитали. Метод МО-ЛКАО. Метод Хартри-Фока. Самосогласованное поле. Полуэмпирические методы. Осо-	10	2	-	-	-	-	2	8	-	8

бенности, классификация и области применения полуэмпирических методов.										
Раздел 3. Методы учета электронной корреляции. Содержание раздела: Природа электронной корреляции. Статическая и динамическая корреляция. Конфигурационные взаимодействия. Теория возмущений. Метод взаимодействующего кластера.	10	2	-	-	-	-	2	8	-	8
Раздел 4. Функционал электронной плотности (DFT). Содержание раздела: Теорема Хоэнберга-Кона. Уравнения Кона-Шэма. Обменно-корреляционный функционал. Основные типы функционалов. Современные подходы к использованию DFT. Нестационарная теория функционала плотности.	20	4	-	-	-	-	4	16	-	16
Раздел 5. Базисные наборы в неэмпирических расчетах. Содержание раздела: Классификация базисных наборов, типы функций, используемых в базисных наборах. Минимальные и расширенные базисы. Типы дополнительных функций. Эффективные	12	2	2	-	-	-	4	8	-	8

ядерные потенциалы и базисы для них.										
Раздел 6. Моделирование электронной структуры молекулярных объектов. Содержание раздела: Модель молекулы в идеальном газе. Поверхность потенциальной энергии (ППЭ). Алгоритмы поиска стационарных точек. Локальный и глобальный минимумы. Моделирование термодинамических и кинетических параметров молекулярных систем. Моделирование континуума. Молекулярные свойства как производные энергии.	6	2	-	-	-	-	2	4	-	4
Раздел 7. Моделирование электронной структуры периодических систем. Содержание раздела: Модели твердого тела. Способы моделирования периодических структур. Модель идеального кристалла и кластерная модель твердого тела. Методы расчета электронной структуры идеального кристалла. Расчеты физических свойств твердых тел.	6	2	-	-	-	-	2	4	-	4
Раздел 8. Подходы к анализу дан-	18	6	-	-	4	-	10	8	-	8

ных, полученных при моделировании. Содержание раздела: Анализ волновой функции. Реконструкционный анализ, граничные орбитали. Заряды на атомах, различные схемы разделения, их достоинства и недостатки. Анализ химической связи на основе распределения электронной плотности. Электронная плотность и ее «производные», разностная плотность. Функция электронной локализации (ELF). Параметр локализации и топология ELF. Индикатор электронной локализуемости (ELI).										
Раздел 9. Примеры программных пакетов для разных типов расчетов. Содержание раздела: Программы для молекулярных и зонных расчетов. Принципы работы, типы используемых базисных функций, приближения, достоинства и недостатки, сравнительный анализ характеристик и возможностей.	10	4	-	2	-	-	6	4	-	4
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>	10						4			6
Итого	108	26	2	2	4		38	64		70

Курс имеет электронную версию для презентации. Лекции читаются с использованием современных мультимедийных возможностей и проекционного оборудования. В преподавании дисциплины используются результаты исследований, полученные сотрудниками МГУ.

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

Аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и перечень домашних заданий. По теме каждой лекции указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы, а также из интернет-ресурсов.

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. В.Г. Цирельсон. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. М.: Бинوم, 2010. / 2-е изд. М: Бином, 2012.
2. F. Jensen Introduction to Computational Chemistry, 2nd Edition, Chichester, John Wiley & Sons, 2007.
3. Н.Ф. Степанов. Квантовая механика и квантовая химия. М: Мир / Изд-во МГУ, 2001
4. В.И.Минкин, Б.Я.Симкин, Р.М.Миняев Теория строения молекул, 2-е изд. Ростов-на-Дону Феникс. 1997
5. Л. Цюликэ Квантовая химия, т.1. Москва Мир 1976

Вспомогательная литература

1. Р.Бейдер Атомы в молекулах: квантовая теория. М.: Мир 2001
2. В.А.Губанов, Э.З.Курмаев, А.Л.Ивановский. Квантовая химия твердого тела. Москва Наука 1984
3. Р. Хоффман. Строение 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. R.A. Evarestov. Theoretical Modeling of Inorganic Nanostructures. Symmetry and ab-initio Calculations of Nanolayers, Nanotubes and Nanowires. Springer, 2015.
7. 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)
8. 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)
9. M. Kohout. A Measure of Electron Localizability. Hoboken Wiley Periodicals, Inc. 2004 International Journal of Quantum Chemistry v. 97 (p.651)

10. 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)

Периодическая литература

- *Advances in Quantum Chemistry, Journal of Computational Chemistry, Theoretical Chemistry Accounts, Chemistry – A European Journal*

Интернет-ресурсы

- NIST Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database <http://cccbdb.nist.gov/>
- Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости): Программные пакеты ParaView 4.1 и VESTA 3.
- Описание материально-технической базы:
Лекционные занятия проводятся в аудитории, оборудованной презентационной техникой.

11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватели:

Кузнецов Алексей Николаевич, д.х.н., ведущий научный сотрудник, чл.-корр. РАН alexei@inorg.chem.msu.ru

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

1. Планируемые результаты обучения приведены в п.5.

Примеры контрольных вопросов для самостоятельной работы и подготовки к зачету

Раздел 1

1. Какую информацию о химических веществах и соединениях можно получить из расчетов?
2. Как классифицируются теоретические методы в химии?
3. Какие объекты можно моделировать?
4. В чем основное различие молекулярной механики и квантовой химии?

Раздел 2

1. Применимость стационарного уравнения Шредингера для описания химических систем?
2. Какие члены входят в гамильтониан многоэлектронной системы?
3. Что такое «спин-орбитали», в чем их особенность?
4. Какие приближения (допущения) используются в методе Хартри-Фока?
5. Что такое «самосогласованные орбитали»?
6. Выстройте полуэмпирические методы в порядке усложнения гамильтониана.
7. В чем состоят достоинства и недостатки полуэмпирических методов в сравнении с методом Хартри-Фока?

Раздел 3

1. Что такое «электронная корреляция», откуда она возникает?
2. Обязателен ли учет электронной корреляции для расчетов химических объектов?
3. В чем суть метода конфигурационных взаимодействий?
4. Позволяют ли методы электронной корреляции полностью учесть энергию корреляции?
5. Сравните эффективность различных методов учета электронной корреляции.
6. Существуют ли ограничения по типу объектов, для которых можно применять методы учета электронной корреляции?

Раздел 4

1. В чем основное ограничение теоремы Хоэнберга-Кона?
2. Что такое функционал плотности?
3. Каково математическое выражение обменно-корреляционного функционала и как он конструируется?
4. Почему существует много форм обменно-корреляционных функционалов?
5. Позволяет ли теория функционала плотности полностью учесть электронную корреляцию?
6. Почему приближение невзаимодействующего электронного газа (газа Ферми) применяется только локально в рамках методов, основанных на теории функционала плотности?
7. Перечислите основные недостатки DFT по сравнению с методами, вводящими поправки для учета электронной корреляции.
8. В чем преимущества и недостатки использования TDDFT по сравнению со стандартным применением методов DFT?

Раздел 5

1. Что такое «базис» и зачем он нужен при выполнении расчетов?
2. Какие классификационные признаки базисов можно выделить?
3. Как выбрать наилучший базис для решения конкретной задачи?

4. Что такое суперпозиция базисных функций?
5. Можно ли использовать эффективные ядерные потенциалы для расчетов химических объектов на основе легких элементов?
6. Почему диффузные и поляризационные функции считаются дополнением к базису?
7. Каковы особенности базисов для моделирования периодических систем?

Раздел 6

1. В каких условиях возможно квантовохимическое моделирование молекул и ионов?
2. Перечислите типы стационарных точек поверхности потенциальной энергии. Каково их математическое выражение?
3. Чем определяется форма поверхности потенциальной энергии?
4. В чем отличие между равновесной и стационарной геометрией?
5. Какие свойства молекул являются производными энергии? Дайте их математические выражения.
6. Можно ли с помощью континуальных моделей описывать процессы в газовой фазе, расплаве?

Раздел 7

1. В чем принципиальное отличие молекулярных расчетов от расчетов твердых тел?
2. Можно ли использовать одинаковые базисные наборы для расчетов молекулярных и периодических объектов?
3. Можно ли рассчитывать зонную структуру идеального кристалла в рамках кластерной модели?
4. Какие существуют способы квантовохимического моделирования дефектной структуры твердого тела?
5. Перечислите достоинства и недостатки использования базисов плоских волн для расчетов зонной структуры кристаллов.
6. Учитывается ли электронная корреляция при расчетах зонной структуры кристаллов?
7. Какие магнитные характеристики периодических кристаллов могут быть смоделированы теоретически?
8. В чем состоит проблема моделирования систем с частично заполненными d-оболочками? Каковы пути ее решения?

Раздел 8

1. Почему непосредственно волновую функцию не используют для описания химической связи?
2. Перечислите способы анализа волновой функции в орбитальном пространстве?
3. В чем достоинства и недостатки анализа электронной плотности в прямом пространстве?
4. В чем состоят главные особенности определения атома в рамках теории Бэйдера?
5. Перечислите основные схемы вычисления зарядов атомов. Каковы принципиальные недостатки вычисления зарядов в орбитальном пространстве, можно ли свести их к минимуму?
6. Можно ли использовать рассчитанную электронную плотность для анализа химических связей?
7. Дайте математическое выражение функции электронной локализации? Каков ее физический смысл?

8. Можно ли использовать ELF для определения количественных характеристик химической связи?
9. Для каких систем будут наблюдаться заметные различия в топологии ELF и ELI?
10. Каким образом строятся бассейны ELI?

Раздел 9

1. Можно ли использовать программы, предназначенные для зонных расчетов, для описания электронной структуры молекул?
2. Какие данные используются для ввода в программу при выполнении молекулярных/зонных расчетов?
3. Что является более важным для корректного выполнения расчета зонной структуры – точные координаты атомов или объем ячейки?
 1. 4. Есть ли различия в подходе к вычислению электронной плотности и ELF между многоцелевыми пакетами программ (GAUSSIAN, WIEN2k и т.п.) и специализированным пакетом DGrid?

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Зачет проводится по билетам; билет включает 3 вопроса. Для подготовки ответа аспирант использует экзаменационные листы, которые сохраняются после приема зачета в течение года. На каждого аспиранта заполняется протокол приема зачета, в который вносятся вопросы билетов и вопросы, заданные соискателю членами комиссии. В случае, если на все вопросы были даны удовлетворительные ответы, аспирант получает зачет. Протокол приема зачета подписывается членами комиссии с указанием их ученой степени, ученого звания, занимаемой должности и специальности согласно номенклатуре специальностей научных работников

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

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
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 непринципального 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
-------------------	--------------------	---------------------------	--	--