

Наименование дисциплины	КВАНТОВАЯ ХИМИЯ
Интерактивные формы обучения	Интерактивные лекции, тренинги, мастер-классы, круглые столы, метод проектов, дискуссии, мини-конференции.
Цели освоения дисциплины	
<ul style="list-style-type: none"> • формирование представлений о современной теоретической химии; • приобретение знаний, умений и навыков для исследования свойств молекулярных систем и решения теоретических задач химии. <p>Задачи дисциплины «Квантовая химия»:</p> <ul style="list-style-type: none"> - раскрыть понятийный аппарат квантовой механики и квантовой химии; - сформировать представления об основах теории строения атомов и молекул, о схемах решения уравнения Шредингера для атомов и молекул; - сформировать начальные навыки практического использования компьютерных программ для решения задач теоретической химии; - сформировать начальные навыки практического использования квантово-химических программ для описания свойств атомов и молекул. - сформировать умения анализировать результаты компьютерного эксперимента. 	
Место дисциплины в структуре ООП	
Дисциплина «Квантовая химия» относится к вариативной части дисциплин блока 1 ООП. Ее преподавание базируется на знаниях и умениях, полученных студентами при изучении предшествующих дисциплин, в том числе математики, физики, химии, информатики, компьютерных технологий.	
Основное содержание	
<p>Введение. Предмет квантовой механики молекулярных систем и квантовой химии. Основные этапы развития квантовой теории. Главные тенденции развития квантовой химии как основного теоретического фундамента современной химической науки.</p> <p style="text-align: center;">Модуль 1. ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ</p> <p>Основные понятия и постулаты квантовой механики. Математический аппарат квантовой механики. Эрмитовы операторы, их собственные функции и собственные значения. Матричное представление операторов. Операторы физических величин. Уравнение Шрёдингера.</p> <p>Простейшие задачи квантовой механики. Формулировка стационарного уравнения Шрёдингера для простейших систем: частица в одномерной потенциальной яме; жесткий ротатор; линейный гармонический осциллятор; атом водорода. Решение уравнения Шрёдингера для линейного гармонического осциллятора и для атома водорода. Атомная система единиц.</p> <p>Спин элементарных частиц и связанный с ним магнитный момент. Операторы спина и коммутационные соотношения. Спин-орбитальное взаимодействие и его проявления. Системы тождественных частиц: фермионы и бозоны. Антисимметричность волновой функции для системы электронов. Представление волновой функции системы электронов в виде определителя.</p> <p>Приближенные методы решения задач квантовой механики. Теория возмущений для стационарных состояний. Вариационный метод, линейный вариационный метод.</p> <p style="text-align: center;">Модуль 2. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ И МЕТОДЫ КВАНТОВОЙ ХИМИИ</p> <p>Уравнение Шрёдингера для атомов и молекул. Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Границы применимости адиабатического приближения.</p> <p>Поверхность потенциальной энергии (ППЭ). Роль представлений о ППЭ в современной структурной теории химии. Равновесная конфигурация и конформации молекул.</p> <p>Метод Хартри-Фока. Построение приближенных решений электронного волнового уравнения на основе вариационного принципа. Одноэлектронное приближение. Метод Хартри-Фока (самосогласованного поля, ССП). Основные, кулоновские и обменные интегралы. Приближенные аналитические функции АО. Радиальные и угловые составляющие АО в многоэлектронных атомах. Атомные орбитали Слетера-Зинера. Гауссовы функции. Эффект экранирования электронов в многоэлектронном атоме. Константа экранирования. Эффективный заряд ядра. Правила для вычисления константы экранирования. Оценка размеров и энергий АО в многоэлектронных атомах. Орбитальные энергии и их связь с полной электронной энергией. Теорема Купманса и фотоэлектронные спектры. Пределы применимости метода Хартри-Фока.</p>	

Метод ССП МО-ЛКАО. Одноэлектронные спин-МО. Многоэлектронная волновая функция. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). Полная энергия электронов в молекуле. Вариационный принцип Ритца. Уравнения Рутаана. Вековое уравнение и вековой определитель. Схема процесса самосогласования в методе Хартри-Фока-Рутаана. Понятие электронной плотности. Занятые и виртуальные орбитали.

Модуль 3. ОСНОВНЫЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ СОВРЕМЕННОЙ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

Корреляция движения электронов. Роль электронной корреляции при описании свойств атомов и молекул. Важнейшие методы учета электронной корреляции.

Приближенные методы конфигурационного взаимодействия: учет однократных, двукратных, троекратных, четырехкратных, ... возбуждений (CISD, CISDT, CISDTQ, ...). Проблема размерной согласованности метода CI.

Метод связанных кластеров (СК, СС). Приближения CCSD, CCSD(T), CCSDT, CCSDTQ, ... в методе СС. Сравнительный анализ достоинств и недостатков методов конфигурационного взаимодействия и связанных кластеров.

Метод теории возмущений Мёллера-Плессе́. Вычисление энергии электронной корреляции во втором порядке теории возмущений Мёллера-Плессе́ (MP2). Сходимость рядов теории возмущений MP_n, n = 2, 3, 4, ...

Иерархия *ab initio* методов квантовой химии.

Полуэмпирические методы квантовой химии. Полное или частичное пренебрежение дифференциальным перекрыванием. π -Электронное приближение. Метод Хюккеля. Принципы параметризации полуэмпирических методов. Наиболее популярные полуэмпирические методы (AM1, PM3 и т.п.), их возможности.

Теория функционала плотности (DFT). Теорема Хоэнберга-Кона. Уравнения Кона-Шэма. Основные типы функционалов плотности. Возможности и ограничения методов DFT.

Модуль 4. СИММЕТРИЯ И СВОЙСТВА МОЛЕКУЛ

Симметрия молекул. Учет симметрии ядерной конфигурации при рассмотрении электронной задачи. Элементы и операции симметрии. Точечные группы симметрии. Представления точечных групп, неприводимые представления и таблицы характеров.

Свойства симметрии волновых функций молекул. Классификация электронных состояний молекул и классификация молекулярных орбиталей по симметрии: σ - и π -орбитали. Орбитали симметрии и эквивалентные орбитали. Связывающие и разрыхляющие орбитали.

Локализованные молекулярные орбитали, натуральные связывающие орбитали и классические представления о химической связи. Групповые орбитали. Связевые орбитали и орбитали неподеленных пар.

Гибридизация и гибридные орбитали в базисе атомных *s*-, *p*- и *d*-орбиталей.

Применение метода МО к многоатомным молекулам. Представление о симметрии молекулы, групповых орбиталях, таблице характеров (на примере молекулы BeH₂).

Электронная структура молекул с мостиковыми связями. Молекула диборана. Геометрическое строение. Концевые и мостиковые связи. Порядки связей. Объяснение термина «молекулы с дефицитом электронов».

Нежесткие молекулы. Внутреннее вращение и инверсия молекул. Потенциальные функции, описывающие ППЭ нежестких молекул. Электронно-колебательное взаимодействие. Эффект Яна-Теллера.

Формируемые компетенции

Способность использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач (ОПК-1);

Способность использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности (ОПК-3);

Владение системой фундаментальных химических понятий (ПК-3);

Способность применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов (ПК-4).

Образовательные результаты

Знания:

АННОТАЦИИ ДИСЦИПЛИН ООП ПОДГОТОВКИ БАКАЛАВРОВ ПО НАПРАВЛЕНИЮ
04.03.01 ХИМИЯ,
ПРОФИЛЬ ПОДГОТОВКИ «ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ХИМИЯ»
ФОРМА ОБУЧЕНИЯ – ОЧНАЯ
СРОК ОСВОЕНИЯ ООП – 4 ГОДА

- основные понятия, законы и теоремы квантовой механики и квантовой химии; возможности современной квантовой химии; применение законов в важнейших практических приложениях;
- сущность и границы применимости приближений (упрощений), вводимых при квантово-химическом описании систем, построенных из ядер и электронов (атомов, молекул, молекулярных комплексов, жидкостей и кристаллов);
- возможности современной квантовой химии: какие типы задач могут быть решены квантово-химическими методами в неорганической, органической и физической химии, в химии координационных соединений, в биохимии

Умения:

- решать прикладные задачи квантовой химии с применением ЭВМ;
- применять основные законы естествознания при обсуждении полученных математических расчетов и компьютерного моделирования

Владение:

- основными вычислительными методами современной квантовой химии;
- практическими навыками по определению структуры и свойств молекул теоретическими и расчетными методами.

Взаимосвязь дисциплины с профессиональной деятельностью выпускника

Образовательные результаты, формирующие представления об особенностях планирования, проведения и анализа результатов квантово-химических расчетов, обеспечивают решение выпускником задач будущей профессиональной деятельности (научно-исследовательской, производственно-технологической, организационно-управленческой, педагогической).

Ответственная кафедра

Кафедра физики

Начальник УМУ _____



Н.Е. Гордина