

Белорусский государственный университет

**УТВЕРЖДАЮ**

Проректор по учебной работе  
и образовательным инновациям

О.И. Чуприс

(подпись)

16.07.2018

(дата утверждения)

Регистрационный № УД-6180 /уч.

**КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ**

**Учебная программа учреждения высшего образования**

**по учебной дисциплине для специальности**

**1-31 04 07 Физика наноматериалов и нанотехнологий**

Минск 2018 г.

Учебная программа составлена на основе Образовательного стандарта ОСВО 1-31 04 07-2013, учебных планов G31-218/уч., №G31и-219/уч. от 20.02.2018 г.

**СОСТАВИТЕЛЬ:**

**А.А. Луговский** — доцент кафедры лазерной физики и спектроскопии Белорусского государственного университета, кандидат химических наук, доцент;

**РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:**

Кафедрой лазерной физики и спектроскопии физического факультета Белорусского государственного университета  
(протокол № 18 от 22 июня 2018 г.);

Советом физического факультета  
(протокол № 12 от 28 июня 2018 г.).

## ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Программа дисциплины «Квантовая механика молекулярных систем» разработана для специальности специальности 1-31 04 07 Физика наноматериалов и нанотехнологий. Дисциплина относится к циклу дисциплин специализации.

Квантово-механическое описание различных систем всегда позволяло более точно выбирать подходы к оптимальному выбору необходимой структуры или подбору эффективных методов синтеза этих систем. Активное развитие возможностей и параметров вычислительной техники в последние годы позволила расширить возможности и точность при вычислениях квантово-механическими методами. С появлением квантово-механических методов расчета молекулярных систем важные качественные изменения произошли в оптике: возобновился интерес к классическим ее разделам, появилась возможность расчета электронной структуры и свойств молекулярных систем, расчетов ИК спектров и термодинамических характеристик молекул, расчетов электронных спектров поглощения и свойств возбужденных состояний.

**Цель** дисциплины — дать студентам теоретические основы квантово-механических методов расчета молекулярных систем, ознакомить их с широко доступными программными продуктами Chem.3D и HyperChem, MOPAC, GAMESS позволяющими проводить оптимизацию геометрии молекул методами *ab initio*, молекулярной механики и полуэмпирическими квантово-химическими методами.

Предлагаемая программа решает задачи ознакомления студентов с важнейшими теоретическими вопросами квантовой механики, а также с конкретными методами расчета молекулярных систем и их практического применения. Приобретенные знания важны для более глубокого и качественного понимания других дисциплин. На примерах молекулярных систем студенты могут увидеть конкретное приложение квантово-механических представлений.

В результате изучения дисциплины студент должен

**знать:**

- основы квантово-механических методов расчета молекулярных систем, ознакомить их с широко доступными программными продуктами Chem.3D и HyperChem, MOPAC, GAMESS.

**уметь:**

- проводить оптимизацию геометрии молекул методами *ab initio*, молекулярной механики и полуэмпирическими квантово-химическими методами.

**владеть:**

- конкретными методами расчета молекулярных систем и их практического применения.

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

### **Академические компетенции:**

- Уметь применять базовые научно-теоретические знания для решения теоретических и практических задач.
- Владеть системным и сравнительным анализом.
- Владеть исследовательскими навыками.
- Уметь работать самостоятельно.
- Быть способным порождать новые идеи (обладать креативностью).
- Владеть междисциплинарным подходом при решении проблем.
- Иметь навыки, связанные с использованием технических устройств, управлением информацией и работой с компьютером.
- Обладать навыками устной и письменной коммуникации.
- Уметь учиться, повышать свою квалификацию в течение всей жизни.

### **Социально-личностные компетенции:**

- Быть способным к социальному взаимодействию.
- Обладать способностью к межличностным коммуникациям.
- Быть способным к критике и самокритике (критическое мышление).
- Уметь работать в команде.

### **Профессиональные компетенции:**

- Применять знания теоретических и экспериментальных основ физики и математики, методы исследования физических объектов, методы измерения физических величин, методы автоматизации эксперимента.
- Использовать новейшие открытия в естествознании, методы научного анализа, информационные образовательные технологии, физические основы современных технологических процессов, научное оборудование и аппаратуру.
- Проводить планирование и реализацию физического эксперимента используя квантово-механические методы.
- Пользоваться глобальными информационными ресурсами, компьютерными методами сбора, хранения и обработки информации, научно-технической и патентной литературой.
- Применять полученные знания фундаментальных положений физики, экспериментальных, теоретических и компьютерных методов исследования.
- Применять знания физических основ современных технологий, методы внедрения инноваций в научно-производственной, научно-педагогической и научно-технической деятельности.

Программа дисциплины основывается на знаниях и представлениях, полученных при изучении дисциплин «Электричество и магнетизм» и «Оптика», «Физика лазеров». Сведения, приобретенные в ходе изучения дисциплины, важны для более глубокого и качественного усвоения дисциплин «Нанофотоника. Волоконная оптика» и «Когерентная оптика и голограммия».

Программа дисциплины составлена в соответствии с требованиями образовательного стандарта. Общее количество часов – 38; аудиторное количество часов – 22, из них: лекции – 16, аудиторный контроль УСР – 6.

Форма получения высшего образования — очная, дневная. Занятия проводятся на 5-ом курсе в 9-ом семестре.

Формы текущей аттестации по учебной дисциплине – зачет (1 зачетная единица).

## СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

1. **Введение.** Краткий обзор основных принципов и этапов развития квантовой механики.

2. **Основные понятия и приближения квантовой химии.** Основные приближения теории: нерелятивистское приближение, адиабатическое приближение, орбитальное приближение. Понятие самосогласованного поля

3. **Неэмпирические методы.** Вывод уравнений Хартри-Фока-Рутана. Теория возмущений. Виды базисных функций. Методы расчета молекулярных одно- и двухэлектронных многоцентровых интегралов.

4. **Методы учета электронной корреляции.** Многодетерминантные волновые функции. Методы ограниченного и полного КВ. Расчет корреляционных эффектов в рамках теории возмущений.

5. **Полуэмпирические методы.** Метод МО ЛКАО и метод Хюккеля. Полуэмпирические методы полного и частичного пренебрежения дифференциальным перекрыванием: CND0, INDO, MNDO, AM1, PM3, ZINDO, ZINDO/S.

6. **Теория функционала плотности.** Основные теоремы теории функционала плотности (ТФП).

7. **Краткое знакомство с методом молекулярной механики.**

8. **Изучение программных пакетов HyperChem, MOPAC, GAMESS.** Ввод данных. Оптимизация геометрии, расчет энергетических и спектральных характеристик.

# УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов					Форма контроля знаний	
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное		
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	Введение.	2						Устный опрос
2	Основные понятия и приближения квантовой химии.							Устный опрос
3	Неэмпирические методы.	2						Устный опрос
4	Методы учета электронной корреляции	2						Устный опрос
5	Полуэмпирические методы.	2					2	Устный опрос, проверка рефератов
6	Теория функционала плотности.	2						Устный опрос
7	Краткое знакомство с методом молекулярной механики	2					2	Устный опрос, проверка рефератов
8	Изучение программных пакетов	2					2	Устный опрос, проверка рефератов
		<b>16</b>					<b>6</b>	<b>Зачет</b>

## **ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ**

### **Перечень основной литературы**

1. Заградник Р., Полак Р. Основы квантовой химии. М.: Мир, 1979.
2. Фудзинага С. Метод молекулярных орбиталей. М.: Мир, 1983.
3. Мак-Вини Р., Сатклиф Б., Квантовая механика молекул. М.: Мир, 1972.
4. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Ростов на Дону: Феникс, 1997.
5. Цюлике П. Квантовая химия. М.: Мир, 1976.
6. Счастнев П.В. Теория электронных оболочек молекул. Новосибирск: Изд-во НГУ, 1973.

### **Перечень дополнительной литературы**

1. Cramer C.J., Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models. Chichester: John Wiley & Sons, 2002.
2. Т . Кларк . Компьютерная химия . – М .: Мир, 1990.-382 с.
3. Сигал Дж . Полуэмпирические методы расчета электронной структуры. М.: Мир, 1980, Т .1.-327 с., Т .2. – 371 с.

### **Перечень используемых средств диагностики результатов учебной деятельности**

1. Реферативные работы.
2. Устные опросы.

### **Мероприятия для контроля управляемой самостоятельной работой**

Для контроля УСР используются проверки рефератов.

### **Перечень тем реферативных работ**

1. Приложение квантово-механических представлений на примерах лазерных систем.
2. Применение метода МО для расчета органических молекул.
3. Расчет корреляционных эффектов в рамках теории возмущений. Метод кластерного разложения.
4. Расчеты молекул с тяжелыми атомами.
5. Основы теории, представления об электронной плотности и вывод уравнений моделей Томаса-Ферми и Томаса-Ферми-Дирака.
6. Конформационный анализ органических молекул с помощью пакета GAMESS.

7. Методы моделирования колебательных спектров сложных молекул различной полярности.

### **Методика формирования итоговой оценки**

Итоговая оценка формируется на основе:

1. Правил проведения аттестации студентов, курсантов, слушателей при освоении содержания образовательных программ высшего образования (постановление Министерства Образования Республики Беларусь № 53 от 29 мая 2012 г.);

2. Положения о рейтинговой системе оценки знаний студентов по дисциплине в Белорусском государственном университете ( № 382-ОД от 18.08.2015 г.);

3. Критериев оценки знаний и компетенций студентов по 10-балльной шкале.

Для текущего контроля качества усвоения знаний по дисциплине рекомендуется использовать проверку рефератов и устные опросы. Контрольные мероприятия проводятся в соответствии с учебно-методической картой дисциплины. В случае неявки на контрольное мероприятие по уважительной причине студент вправе по согласованию с преподавателем выполнить его в дополнительное время. Для студентов, получивших неудовлетворительные оценки за контрольные мероприятия, либо не явившихся по неуважительной причине, по согласованию с преподавателем и с разрешения заведующего кафедрой мероприятие может быть проведено повторно. Защита реферативных работ проводится в форме индивидуальных выступлений-презентаций с последующей дискуссией. Оценка рефератов проводится по десятибалльной шкале.

Текущая аттестация по учебной дисциплине проводится в форме зачета, к зачету допускаются студенты, чья оценка текущей успеваемости не менее 4 баллов.

## ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УВО

Название дисциплины, с которой требуется согласование	Название Кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы по изучаемой учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
Когерентная оптика и голография	Кафедра лазерной физики и спектротермии	Оставить содержание учебной дисциплины без изменения	Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте (протокол № 18 от 22 июня 2018 г.)
Нанофотоника. Волоконная оптика	Кафедра лазерной физики и спектротермии	Оставить содержание учебной дисциплины без изменения	Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте (протокол № 18 от 22 июня 2018 г.)

**ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ УВО**  
 на \_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_ учебный год

№ № пп	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры  
 (протокол № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.)

Заведующий кафедрой  
 лазерной физики и спектроскопии  
 д.ф.-м.н., профессор

\_\_\_\_\_ А.Л. Толстик

УТВЕРЖДАЮ  
 Декан физического факультета  
 д.ф.-м.н., профессор

\_\_\_\_\_ В.М. Анищик