

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, MORAC, 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, MORAC, 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 «Нанопотоника. Волоконная оптика» и «Когерентная оптика и голография».

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

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-бальной 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 спектроскопии	Оставить содержание учебной дисциплины без изменения	Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте (протокол № 18 от 22 июня 2018 г.)
Нанопотоника. Волоконная оптика	Кафедра лазерной физики и спектроскопии	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