



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Дальневосточный федеральный университет»
(ДВФУ)
ИНСТИТУТ НАУКОЕМКИХ ТЕХНОЛОГИЙ И ПЕРЕДОВЫХ МАТЕРИАЛОВ
(ШКОЛА)

СОГЛАСОВАНО
Руководитель ОП


(подпись) Патрушева О.В.
(ФИО)



УТВЕРЖДАЮ

Директор Департамента ядерных технологий


(подпись) Патрушева О.В.
(И.О. Фамилия)
«15» февраля 2023 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Основы квантового моделирования и молекулярный дизайн

Направление подготовки 22.03.01 «Материаловедение и технологии материалов»
профиль «Материаловедение и управление свойствами материалов (совместно с МИФИ)»

Форма подготовки: очная

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта по направлению подготовки 22.03.01 **Материаловедение и технологии материалов**, утвержденного приказом Минобрнауки России от 02 июня 2020 г. №701.

Директор департамента общей и экспериментальной физики В.В. Короченцев.
Составитель: к.ф.-м.н. доцент Голик С.С.

Владивосток
2023

Оборотная сторона титульного листа РПД

Рабочая программа рассмотрена на заседании департамента общей и экспериментальной физики и утверждена на заседании Департамента ядерных технологий, протокол от «11» февраля 2023 г. № 06.

1. Рабочая программа пересмотрена на заседании Департамента/кафедры/отделения (реализующего дисциплину) и утверждена на заседании Департамента/кафедры/отделения (выпускающего структурного подразделения), протокол от «___» _____ 202 г. № ____

2. Рабочая программа пересмотрена на заседании Департамента/кафедры/отделения (реализующего дисциплину) и утверждена на заседании Департамента/кафедры/отделения (выпускающего структурного подразделения), протокол от «___» _____ 202 г. № ____

3. Рабочая программа пересмотрена на заседании Департамента/кафедры/отделения (реализующего дисциплину) и утверждена на заседании Департамента/кафедры/отделения (выпускающего структурного подразделения), протокол от «___» _____ 202 г. № ____

4. Рабочая программа пересмотрена на заседании Департамента/кафедры/отделения (реализующего дисциплину) и утверждена на заседании Департамента/кафедры/отделения (выпускающего структурного подразделения), протокол от «___» _____ 202 г. № ____

5. Рабочая программа пересмотрена на заседании Департамента/кафедры/отделения (реализующего дисциплину) и утверждена на заседании Департамента/кафедры/отделения (выпускающего структурного подразделения), протокол от «___» _____ 202 г. № ____

Аннотация дисциплины «Основы квантового моделирования и молекулярный дизайн»

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачётных единицы /108 академических часов. Является дисциплиной части, формируемой участниками образовательных отношений, изучается на 3 курсе и завершается *зачетом*. Учебным планом предусмотрено проведение, лекций – 32 часа лабораторных работ - 32 часа, а также выделены часы на самостоятельную работу студента - 44 часа.

Язык реализации: русский.

Цель:

Цель: подготовка студентов к квантово-химическому моделированию молекул и кристаллов, а также к самостоятельным компьютерным вычислениям электронного строения, пространственной структуры и физико-химических свойств различных молекулярных систем.

Задачи:

- 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 навыки практического использования компьютерных программ для моделирования молекулярных систем.

Для успешного изучения дисциплины «Основы квантового моделирования и молекулярный дизайн» у обучающихся должны быть сформированы предварительные универсальные компетенции.

Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы, характеризуют формирование следующих компетенций, индикаторов достижения компетенций:

Наименование категории (группы) компетенций	Код и наименование компетенции (результат освоения)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Наименование показателя оценивания (результата обучения по дисциплине)
Научно-исследовательский	ПК-1 Способен использовать в исследованиях и расчетах знания о методах исследования, анализа, диагностики и моделирования свойств материалов, физических и химических процессах, протекающих в материалах при их получении, обработке и модификации и	ПК-1.4 Применяет методы моделирования для управления свойствами материалов и их модификации	Знает основные современные методы квантово-химического моделирования (неэмпирические и полуэмпирические методы, теорию функционала плотности); Имеет представления об ограничениях и возможностях разных методов для моделирования электронной структуры материала
			Умеет определять необходимую информацию для моделирования электронной структуры молекул и анализировать данные расчетов; Умеет ориентироваться в обширной литературе, использующей данные квантово-химических расчетов.
			Владеет навыками квантового моделирования физико-химических характеристик веществ, а также навыками построения физических и математических моделей процессов

1. Цели и задачи дисциплины:

Цель: подготовка студентов к квантово-химическому моделированию молекул и кристаллов, а также к самостоятельным компьютерным вычислениям электронного строения, пространственной структуры и физико-химических свойств различных молекулярных систем.

Задачи:

- 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 навыки практического использования компьютерных программ для моделирования молекулярных систем.

Для успешного изучения дисциплины «Основы квантового моделирования и молекулярный дизайн» у обучающихся должны быть сформированы предварительные универсальные компетенции

В результате освоения дисциплины у студентов формируются следующие профессиональные компетенции:

Наименование категории (группы) компетенций	Код и наименование компетенции (результат освоения)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Наименование показателя оценивания (результата обучения по дисциплине)
Научно-исследовательский	ПК-1 Способен использовать в исследованиях и расчетах знания о методах исследования, анализа, диагностики и моделирования свойств материалов, физических и химических процессах, протекающих в материалах при их	ПК-1.4 Применяет методы моделирования для управления свойствами материалов и их модификации	Знает основные современные методы квантово-химического моделирования (неэмпирические и полуэмпирические методы, теорию функционала плотности); Имеет представления об ограничениях и возможностях разных методов для моделирования электронной структуры материала
			Умеет определять необходимую информацию для моделирования электронной структуры молекул и

	получении, обработке и модификации		анализировать данные расчетов; Умеет ориентироваться в обширной литературе, использующей данные квантово-химических расчетов.
			Владеет навыками квантового моделирования физико-химических характеристик веществ, а также навыками построения физических и математических моделей процессов

II. Трудоёмкость дисциплины и видов учебных занятий по дисциплине.

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 5 зачётных единиц (180 академических часов).

Структура дисциплины:

Форма обучения – очная.

№	Наименование раздела дисциплины	Семестр	Количество часов по видам учебных занятий и работы обучающегося						Формы промежуточной аттестации
			Лек	Лаб	Пр	ОК	СР	Контроль	
1	Раздел I. Основы квантовой механики.	7	14	14					зачет
2	Раздел II. Основные положения и методы квантового моделирования молекул.	7	18	18		-	44		
	Итого:		32	32		-	44		

III. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА

Лекционные занятия (32 час.)

Раздел 1. Основы квантовой механики (14 часов)

Тема 1. Основные постулаты квантовой механики (4 часа)

Квантовые состояния и волновые функции; основные свойства волновых функций. Операторы физических величин (наблюдаемых); средние значения и дисперсии наблюдаемых. Плотность вероятности распределения частиц в пространстве.

Математический аппарат квантовой механики. Эрмитовы операторы, их собственные функции и собственные значения. Вырождение. Матричное представление операторов. Разложение по собственным функциям эрмитова оператора. Коммутационные соотношения.

Тема 2. Соотношения неопределенностей. Уравнение Шредингера (4 часа)

Операторы координат, импульсов, моментов импульса, кинетической и потенциальной энергии. Оператор Гамильтона (гамильтониан). Физический смысл соотношений неопределенностей и простейшие оценки на их основе.

Эволюция состояний и уравнение Шредингера. Стационарное уравнение Шредингера. Дискретный и непрерывный спектры. Уравнение непрерывности.

Тема 3. Примеры применения квантовой механики (4 часа)

Одномерные задачи: спектр, качественные особенности волновых функций. Задачи о прямоугольном потенциальном ящике, потенциальном барьере и гармоническом осцилляторе.

Тема 4. Приближенные методы решения квантово-механических задач. (2 часа)

Теория возмущений для стационарных состояний в отсутствие и при наличии вырождения. Вариационный принцип квантовой механики и вариационный метод. Метод Ритца.

Раздел 2. Основные положения и методы квантового моделирования молекул. (18 часов).

Тема 1. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. (2 час)

Разделение электронного и ядерного движений. Адиабатическое приближение. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Поверхность потенциальной энергии. Роль представлений о

поверхности потенциальной энергии в современной структурной теории химии. Равновесная конфигурация и конформации молекул. Малые колебания ядер вблизи положения равновесия. Колебания с большими амплитудами. Вращение системы ядер как целого.

Тема 2. Электронное волновое уравнение (2 час)

Электронное волновое уравнение. Электронная плотность и ее изменения при переходе от разделенных атомов к молекуле. Построение приближенных решений электронного волнового уравнения на основе вариационного принципа. Одноэлектронное приближение. Метод Хартри - Фока (самосогласованного поля, ССП). Уравнения, определяющие орбитали. Орбитальные энергии и их связь с полной электронной энергией. Теорема Купманса и фотоэлектронные спектры. Пределы применимости метода Хартри-Фока.

Тема 3. Метод молекулярных орбиталей (2 час)

Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). Наиболее распространенные типы базисов атомных орбиталей: орбитали слейтеровского и гауссова типа. Метод ССП МО ЛКАО.

Тема 4. Теория функционала плотности (2 час)

Представление о методах функционала электронной плотности. Сравнение различных функционалов.

Тема 6. Симметрия и свойства молекул (6 часов)

Элементы и операции симметрии. Точечные группы симметрии. Представления точечных групп, неприводимые представления и таблицы характеров.

Классификация электронных состояний молекул и классификация молекулярных орбиталей по симметрии. σ - и π -орбитали, π -электронное приближение. Орбитали симметрии и эквивалентные орбитали.

Связывающие и разрыхляющие орбитали.

Тема 7. Программное обеспечение для моделирования (6 часов).

Современное программное обеспечение квантово-химических расчетов. Наиболее распространенные программные комплексы.

IV. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ПРАКТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА И САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

Лабораторные работы (32 час.)

Занятие 1. Волновая функция и ее свойства. Нормировка волновой функции, нахождение средних значений физических величин. (обсуждение в группах) (4 часа)

Занятие 2. Операторы в квантовой механике. Операторы динамических переменных (координаты, импульса, момента импульса, энергии, квадрата момента импульса). Расчет собственных значений и собственных функций операторов на примерах. (обсуждение в группах) (4 часов)

Занятие 3. Использование волнового уравнения Шредингера (обсуждение в группах) (2 часа)

Занятие 4. Симметрия электронной волновой функции. Неприводимые представления. (обсуждение в группах) (2 часов)

Занятие 5. Геометрия молекул в декартовых и внутренних координатах. Группы симметрии. (обсуждение в группах) (2 часов)

Занятие 6. Расчет геометрии основного состояния (обсуждение в группах) (4 часа)

Занятие 7. Оптимизация геометрии (обсуждение в группах) (4 часа)

Занятие 8. Колебательные спектры (решение задач с обсуждением) (6 часа)

Занятие 9. Электронные спектры (обсуждение в группах) (4 часов)

V. КОНТРОЛЬ ДОСТИЖЕНИЯ ЦЕЛЕЙ КУРСА

№ п/п	Контролируемые модули/разделы / темы дисциплины	Коды и этапы формирования компетенций		Оценочные средства - наименование	
				текущий контроль	промежуточная аттестация
1	Раздел 1. Основы квантовой механики	ПК-1.4 Применяет методы моделирования для управления свойствами материалов и их модификации	Знает основные современные методы квантово-химического моделирования (неэмпирические и полуэмпирические методы, теорию функционала плотности);	Контрольная работа (ПР-2)	Экзамен, вопросы № 1 - 10 Экзамен, вопросы
			Умеет определять необходимую информацию для моделирования электронной структуры молекул и анализировать данные расчетов;	Контрольная работа. (ПР-2)	

			Владеет навыками квантового моделирования физико-химических характеристик веществ, а также навыками построения физических и математических моделей процессов	Работа на семинарских занятиях	
2	Раздел 2. Основные положения и методы квантового моделирования молекул.	ПК-1.4 Применяет методы моделирования для управления свойствами материалов и их модификации	Имеет представления об ограничениях и возможностях разных методов для моделирования электронной структуры материала	Контрольная работа (ПР-2)	№ 10 - 26
			Умеет ориентироваться в обширной литературе, использующей данные квантово-химических расчетов.	Контрольная работа. (ПР-2)	
			Владеет навыками квантового моделирования физико-химических характеристик веществ, а также навыками построения физических и математических моделей процессов	Работа на семинарских занятиях	

VI. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Самостоятельная работа определяется как индивидуальная или коллективная учебная деятельность, осуществляемая без непосредственного руководства педагога, но по его заданиям и под его контролем. Самостоятельная работа – это познавательная учебная деятельность, когда последовательность мышления студента, его умственных и практических операций и действий зависит и определяется самим студентом.

Самостоятельная работа студентов способствует развитию самостоятельности, ответственности и организованности, творческого подхода к решению проблем учебного и профессионального уровня, что в итоге приводит к развитию навыка самостоятельного планирования и реализации деятельности.

Целью самостоятельной работы студентов является овладение необходимыми компетенциями по своему направлению подготовки, опытом творческой и исследовательской деятельности.

Формы самостоятельной работы студентов:

- работа с основной и дополнительной литературой, интернет ресурсами;

- самостоятельное ознакомление с лекционным материалом, представленным на электронных носителях, в библиотеке образовательного учреждения;
- работа с основной и дополнительной литературой, интернет ресурсами;
- самостоятельное ознакомление с лекционным материалом, представленным на электронных носителях, в библиотеке образовательного учреждения;
- подготовка реферативных обзоров источников периодической печати, опорных конспектов, заранее определенных преподавателем;
- поиск информации по теме, с последующим ее представлением в аудитории в форме доклада, презентаций;
- подготовка к выполнению аудиторных контрольных работ;
- выполнение домашних контрольных работ;
- выполнение тестовых заданий, решение задач;
- составление схем;
- подготовка сообщений к выступлению на семинаре, конференции;
- заполнение рабочей тетради;
- подготовка к зачетам и экзаменам;
- другие виды деятельности, организуемые и осуществляемые образовательным учреждением и органами студенческого самоуправления.

VI. СПИСОК УЧЕБНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература

(электронные и печатные издания)

1. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия [Электронный ресурс] / В.И. Барановский. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2017. — 428 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/92941>. — Загл. с экрана.
2. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. пособ. для студ. вузов, обуч. по химич. спец. / В. И. Барановский .— М. : Академия, 2008 .— 383 с. — (Высшее профессиональное образование) .— Режим доступа: <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+1160+default+2+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>.
3. Майер И., Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул [Электронный ресурс] : учебное пособие / Майер И. ; под ред. А. Л. Чугреева ; пер. с англ. М. Б. Дарховского, А. М. Токмачева. —

- Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 387 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94102>. — Загл. с экрана.
4. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.Г. Цирельсон. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 522 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94104>. — Загл. с экрана. Киселёв В. В. / Квантовая механика. Курс лекций / М.: МЦНМО, 2009. - 560 с.
 5. Демидович, Б.П. Математические основы квантовой механики [Электронный ресурс] : учебное пособие / Б.П. Демидович. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2005. — 200 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/604>. — Загл. с экрана.
 6. Крашенинин В.И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам [Электронный ресурс] / В.И. Крашенинин ; Е.Г. Газенаур ; Л.В. Кузьмина .— Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2012 .— 56 с. — Режим доступа: [http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+1160+default+9+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus](http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+1160+default+9+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus;);
 7. [:http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678](http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678)>.

Дополнительная литература

(электронные и печатные издания)

1. Хурсан С.Л. Методические указания для семинарских и практических занятий по курсу "Квантовая механика и квантовая химия"(раздел "Квантовая механика" : Учебное пособие / С.Л.Хурсан, Уч.-науч.комплекс "Интеграция" .— Уфа : Реактив, 2000 .— 43с. : ил. — Обяз.экз. — ISBN 5883330681 (Беспл.). <URL: <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+3920+default+7+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>>.
2. Ермаков, А. И. Квантовая механика и квантовая химия : учеб. пособ. для студ. вузов, обуч. по спец. ВПО 020101.65 "Химия" / А. И. Ермаков .— М. : Юрайт, 2010 .— 555 с. — (Основы наук) .— ISBN 978-5-9916-0587-8. — ISBN 978-5-9692-0331-0. <URL: <http://ecatalog.bashlib.ru/cgi-bin/zgate.exe?present+3920+rs2+14+1+F+1.2.840.10003.5.102+rus>>.
3. Шпольский, Э.В. Атомная физика. Том 2. Основы квантовой механики и строение электронной оболочки атома [Электронный ресурс] : учебник / Э.В. Шпольский. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань,

2010. — 448 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/443>. — Загл. с экрана.

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

1. Универсальная Базы данных EastView (доступ к электронным научным журналам) - <https://dlib.eastview.com/browse>
2. Научная электронная библиотека - elibrary.ru (доступ к электронным научным журналам) - https://elibrary.ru/projects/subscription/rus_titles_open.asp
3. <http://www.physbook.ru/>
4. <https://www.rp-photonics.com/encyclopedia.html>

VII. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Успешное освоение дисциплины предполагает активную работу студентов на всех занятиях аудиторной формы: лекциях и практиках, выполнение аттестационных мероприятий. В процессе изучения дисциплины студенту необходимо ориентироваться на проработку лекционного материала, подготовку к практическим занятиям, выполнение контрольных и лабораторных работ.

Освоение дисциплины «Основы квантового моделирования и молекулярный дизайн» предполагает возможность использования рейтинговой системы оценки знаний студентов и предусматривает со стороны преподавателя текущий контроль за посещением студентами лекций, подготовкой и выполнением всех практических заданий, выполнением всех видов самостоятельной работы.

Промежуточной аттестацией по дисциплине «Основы квантового моделирования и молекулярный дизайн» является экзамен.

Студент считается аттестованным по дисциплине при условии выполнения всех видов текущего контроля и самостоятельной работы, предусмотренных учебной программой.

Шкала оценивания сформированности образовательных результатов по дисциплине представлена в фонде оценочных средств (ФОС).

VIII. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
690922, Приморский край, г. Владивосток, о. Русский, кампус ДВФУ, п. Аякс, 10, Корпус L, ауд. L 501, L 608 (учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа)	<p>Мультимедийное оборудование: ЖК-панель 47", Full HD, LG M4716 ССВА - 1 шт. Парты и стулья</p> <p>Мультимедийное оборудование: ЖК-панель 47", Full HD, LG M4716 ССВА - 1 шт. Парты и стулья</p>	
690922, Приморский край, г. Владивосток, остров Русский, полуостров Саперный, поселок Аякс, 10, корп. А (Лит. П), Этаж 10, каб. А1017. Аудитория для самостоятельной работы	<p>Оборудование: Моноблок Lenovo С360G-i34164G500UDK – 15 шт. Интегрированный сенсорный дисплей Polymedia FlipBox - 1 шт. Копир-принтер-цветной сканер в e-mail с 4 лотками Xerox WorkCentre 5330 (WC5330C – 1 шт.)</p>	