

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/

«27» февраля 2017 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

**Валентное приближение и эффективные потенциалы остова  
в квантовой химии**

**Уровень высшего образования:**

Специалитет

---

**Направление подготовки (специальность):**

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

**Направленность (профиль) ОПОП:**

Физическая химия

**Форма обучения:**

очная

---

Рабочая программа рассмотрена и одобрена  
Учебно-методической комиссией факультета  
(протокол №1 от 27.01.2017)

Москва 2017

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 / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 22 июля 2011 года № 729 (в редакции приказов МГУ от 22 ноября 2011 года № 1066, от 21 декабря 2011 года № 1228, от 30 декабря 2011 года № 1289, от 27 апреля 2012 года № 303, от 30 декабря 2016 года № 1671).

Год (годы) приема на обучение

2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019

---

1. Наименование дисциплины (модуля) **Валентное приближение и эффективные потенциалы остова в квантовой химии**
2. Уровень высшего образования – **специалитет.**
3. Направление подготовки: **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.**
4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.
5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Компетенция	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
<b>СПК-1.С.</b> Способность использовать теоретические основы современных физико-химических методов исследования и анализа систем различной природы при решении практических задач	<b>Знать:</b> общую методологию валентного приближения в квантовой химии <b>Уметь:</b> предложить адекватную поставленной задаче модель остова для заданного атома <b>Уметь:</b> применить теоретические основы валентного приближения при анализе и представлении материала научного сообщения на заданную тему <b>Владеть:</b> навыками использования описанных в литературе остоновых потенциалов для решения поставленной квантово-химической задачи
<b>СПК-4.С.</b> Способность использовать физические и математические модели с учетом их возможностей и ограничений при обработке и интерпретации экспериментальных данных в избранной области физической химии	<b>Знать:</b> основные теоретические концепции квантовой химии, используемые при разработке различных видов остоновых потенциалов, возможности и ограничения этого подхода <b>Уметь:</b> оценить возможные источники ошибок при изучении систем различной природы <b>Владеть:</b> первичными навыками объяснения и предсказания электронной структуры атомов, молекул и веществ на основе концепции валентного приближения и методов, основанных на эффективных потенциалах остова

6. Объем дисциплины 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 зачетных единицы, всего 108 часа, из которых 40 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (18 часов занятия лекционного типа, 18 часа – занятия семинарского типа, 2 часа – групповые консультации, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 68 часа составляет самостоятельная работа студента.*

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

Обучающийся должен

**Знать:** основы классической и квантовой механики, квантовой химии и строения молекул.

**Уметь:** применять стандартные методы алгебры и анализа для решения конкретных задач, формулировать и решать простейшие задачи на основе усвоенных законов и закономерностей.

**Владеть:** простейшим математическим аппаратом и навыками решения типовых задач квантовой механики молекул.

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

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля),  форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы из них		
		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 и т.п.	Всего
Тема 1. Разделение валентных и остовных состояний.	<b>14</b>	2	2				<b>4</b>	10		<b>10</b>
Тема 2. Метод модельного остовного потенциала Хузинаги.	<b>19</b>	2	4				<b>6</b>	13		<b>13</b>
Тема 3. Метод псевдопотенциала. Модельные псевдопотенциалы.	<b>17</b>	2	2				<b>4</b>	13		<b>13</b>

Тема 4. Неэмпирические псевдопотенциалы.	<b>18</b>	2	4				<b>6</b>	12		<b>12</b>
Тема 5. Учет релятивистских эффектов.	<b>6</b>	4	2				<b>6</b>	0		<b>0</b>
Тема 6. Применение псевдопотенциалов в зонных расчетах твердых тел.	<b>16</b>	4	2				<b>6</b>	10		<b>10</b>
Тема 7. Эффективные потенциалы молекулярных фрагментов.	<b>16</b>	2	2	2			<b>6</b>	10		<b>10</b>
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>	<b>2</b>					2	<b>2</b>			
<b>Итого</b>	<b>108</b>	<b>18</b>	<b>18</b>	<b>2</b>		<b>2</b>	<b>40</b>	68		<b>68</b>

#### 9. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

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

Студентам предоставляется программа курса, план занятий и по ходу занятий, наборы заданий для самостоятельной работы. По теме каждого занятия указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы.

#### 11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

#### Основная литература

1. И. В. Абаренков, В. Ф. Братцев, А. В. Тулуб. Начала квантовой химии. М.: Высш. шк., 1989. – 303 с.

2. А. В. Зайцевский. Релятивистская теория электронного строения молекул. Методическая разработка. Химический факультет МГУ, 2005. – 92 с.

### Дополнительная литература

1. P. Pyykko and H. Stoll: Relativistic pseudopotential calculations, 1993-June 1999, R. S. C. Specialist Periodical Reports, Chemical Modelling, 2. Applications and Theory, Vol. 1, 239-305 (2000).
  2. K. G. Dyall. J. Chem. Inf. Comput. Sci. 41, 30-37 (2001).
  3. M. Dolg. Effective Core potentials. Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry. Ed. by J. Grotendorst, John von Neumann Institute for Computing, Jlich, NIC Series, Vol. 1, 479-508 (2000).
  4. M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan, T. A. Arias and J. D. Joannopoulos, Rev. Mod. Phys. 64, 1045-1097 (1992)
12. Язык преподавания – русский
13. Преподаватели:  
с.н.с., к.ф.-м.н., Щербинин Андрей Владимирович, кафедра физической химии химического факультета МГУ;  
e-mail: scherb@classic.chem.msu.su

### Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачёта. На зачёте проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.5.

### Вопросы для зачета:

1. Разделение валентных и остовных состояний в приближении Хартри-Фока. Проблемы остовно-валентной ортогональности, «вариационного коллапса» и пути их преодоления.
2. Подходы, основанные на сдвиге остовных уровней. Метод модельного остовного потенциала Хузинаги.
3. Подходы, основанные на введении безузловых псевдовалентных орбиталей. Метод остовного псевдопотенциала. Физические предпосылки метода. Модельные псевдопотенциалы для случая одного валентного электрона.
4. Неэмпирические псевдопотенциалы. Попытки «строгого» вывода уравнений метода псевдопотенциала из уравнений Хартри-Фока. Конструкция Филипса-Клейнмана и ее обобщения. Проблемы, возникающие при практическом использовании «строгих» конструкций псевдопотенциала, и возможные альтернативы.
5. Псевдопотенциалы, согласованные по форме орбитали в валентной области (shape - consistent).
6. Псевдопотенциалы, согласованные по энергии (energy - consistent).
7. Сравнительный анализ различных конструкций псевдопотенциала. Примеры исследований. Учет валентной корреляции.

8. Релятивистские эффекты при описании тяжелых атомов. Учет скалярных релятивистских эффектов в рамках основного приближения. Эффективные операторы спин-орбитального взаимодействия.
9. Применение псевдопотенциалов в зонных расчетах твердых тел. Основные принципы современных зонных расчетов. Псевдопотенциалы, сохраняющие норму орбитали. Псевдопотенциалы Клейнмана – Байлендера. «Сверхмягкие» псевдопотенциалы Вандербиля.
10. Эффективные потенциалы молекулярных фрагментов.

### Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

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	2	3	4	5
Результат				
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 непринципиального 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

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
<b>Знать:</b> общую методологию валентного приближения в квантовой химии <b>Знать:</b> основные теоретические концепции квантовой химии, используемые при разработке различных видов остоновых потенциалов, возможности и ограничения этого подхода	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете
<b>Уметь:</b> предложить адекватную поставленной задаче модель остова для заданного атома <b>Уметь:</b> применить теоретические основы валентного приближения при анализе и представлении материала научного сообщения на заданную тему	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете

<b>Уметь:</b> оценить возможные источники ошибок при изучении систем различной природы	
<b>Владеть:</b> навыками использования описанных в литературе основных потенциалов для решения поставленной квантово-химической задачи <b>Владеть:</b> первичными навыками объяснения и предсказания электронной структуры атомов, молекул и веществ на основе концепции валентного приближения и методов, основанных на эффективных потенциалах остова	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете