

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**ФГАОУ ВО "Новосибирский национальный
исследовательский государственный университет"**

Факультет естественных наук

УТВЕРЖДАЮ



Декан ФЕН НГУ, профессор

Резников В.А.

«29» августа 2014 г.

Квантово-химические методы в катализе

**Модульная программа лекционного курса,
семинаров, практикума и самостоятельной работы
студентов**

Курс 1–й, II семестр

Учебно-методический комплекс

Новосибирск 2014

Учебно-методический комплекс предназначен для студентов IV курса факультета естественных наук по направлению подготовки «020100 «Химия (магистр)» (квалификация магистр). В состав комплекса включена программа курса лекций «Квантово-химические методы в катализе» и его структура.

Составитель

д.х.н. Зильберберг И.Л., доцент

© Новосибирский государственный университет, 2014

Содержание

Аннотация рабочей программы	4
1. Цели освоения дисциплины	5
2. Место дисциплины в структуре ООП	6
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины	7
4. Структура и содержание дисциплины	9
Рабочий план (по неделям семестров)	10
4а. Программа курса лекций	11
4б. Практикум	12
5. Образовательные технологии	13
6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины	14
7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	15
8. Материально-техническое обеспечение дисциплины	16

Аннотация рабочей программы

Дисциплина «Квантово-химические методы в катализе» относится к вариативной части (профильные дисциплины) профессионального (специального) цикла ООП по направлению подготовки «020100 «Химия» (квалификация (степень) магистр). Дисциплина реализуется на Факультете естественных наук Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Новосибирский национальный исследовательский государственный университет" (НГУ) кафедрой адсорбции и катализа.

Данная дисциплина предназначена для освоения теоретических основ и практического использования квантово-химических методов исследования каталитических систем, основанных на соединениях переходных металлов.

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника общекультурных компетенций: ОК-5, ОК-6, профессиональных компетенций: ПК-1, ПК-2, ПК-3, ПК-4, ПК-5, ПК-6, ПК-7.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, практические занятия по квантово-химическим расчетам (практикум), самостоятельная работа над проектом, домашние задания, консультации, самостоятельная работа студента.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Сдача проекта. Предполагается, что каждый студент самостоятельно проделает расчеты различных свойств модельного соединения переходного металла.

Итоговый контроль. Устный экзамен в конце курса.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единицы. Всего 108 академических часов. Программой дисциплины предусмотрены 16 часов лекций, 12 часов практических занятий в компьютерном классе, а также 72 часа самостоятельной работы студентов. Остальное время – контроль в форме приема проекта и экзамена.

1. Цели освоения дисциплины

Дисциплина «Квантово-химические методы в катализе» предназначена для формирования представления о теоретических основах методов квантовой химии и навыков практического использования стандартных квантово-химических пакетов (типа Gaussian) для исследования электронной и геометрической структуры молекул и комплексов переходных металлов.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Квантово-химические методы в катализе» относится к вариативной части (профильные дисциплины) профессионального (специального) цикла ООП по направлению подготовки «020100 ХИМИЯ», уровень подготовки – «магистр».

Дисциплина «Квантово-химические методы в катализе» опирается на следующие дисциплины данной ООП:

- Физика (квантово-механическое описание вещества, волновая функция, гамильтониан)
- Высшая алгебра (матрицы, уравнение на собственные значения и векторы матрицы)
- Физическая химия (строение и свойства атома, природа химической связи, химическая реакция, понятия о кинетике и термодинамике реакций);
- Неорганическая химия (строение и свойства атомов, строение молекул, химическая связь);
- Основы компьютерной грамотности (навыки обращения с ПК);
- Строение вещества.

Результаты освоения дисциплины «Квантово-химические методы в катализе» используются в следующих дисциплинах данной ООП:

- Молекулярный дизайн катализаторов
- Адсорбция и пористая структура
- Кинетика гетерогенных каталитических реакций
- Физические методы в катализе и адсорбции
- Применение ЭВМ в каталитических исследованиях
- Научно-исследовательская практика
- Итоговая государственная аттестация

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины «Квантово-химические методы в катализе»:

- **общекультурные компетенции:**
 - *владением современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований (ОК-5);*
 - *пониманием принципов работы и умением работать на современных научных приборах и оборудовании при проведении научных исследований (ОК-6);*
- **профессиональные компетенции:**
 - *наличием представления об актуальных направлениях исследований в современной теоретической и экспериментальной химии (синтез и применение веществ в наноструктурных технологиях, исследования в критических условиях, химия жизненных процессов, химия и экология и другие) (ПК-1);*
 - *знанием основных этапов и закономерностей развития химической науки, пониманием объективной необходимости возникновения новых направлений, наличием представления о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, форм и методов научного познания, их роли в общеобразовательной профессиональной подготовке химиков (ПК-2);*
 - *владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии (в соответствии с профильной направленностью магистерской диссертации) (ПК-3);*
 - *умением анализировать научную литературу с целью выбора направления исследования по предлагаемой научным руководителем теме и самостоятельно составлять план исследования (ПК-4);*

- *способностью анализировать полученные результаты, делать необходимые выводы и формулировать предложения (ПК-5);*
- *наличием опыта профессионального участия в научных дискуссиях (ПК-6).*

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- иметь представление о теории Хартри-Фока и теории функционала плотности DFT и численных методах решения уравнений самосогласованного поля для различных многоэлектронных систем;
- приобрести навыки расчетов молекул и комплексов в рамках пакета Gaussian.
- иметь представление о круге задач в области исследования гетерогенных катализаторов, для которых возможно применение методов квантовой химии;

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единицы, всего 108 академических часов.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)							Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)		
				Лекция	Семинарские занятия	Лабораторная работа	Контр. работа	Коллоквиумы	Домашние задания	Самост. работа	Проект	Экзамен	
1.1	Теоретический раздел Квантовая химия в каталлизе	8	4-7	16						16			
1.2	Практическое использование пакета Gaussian для расчета молекул	8	8-10			12				12			
										12	4		Сдача проекта
										32		4	Экзамен
	Всего за курс:			16		12				72	4	4	

Рабочий план (по неделям семестра)

Неделя	Темы занятий
Март 4-7	Место семинара – лекции (учебный класс в Институте катализа СО РАН).
1-я неделя	Лекция 1. Электронный гамильтониан Лекция 2. Волновая функция многоэлектронной системы
2-я неделя	Лекция 3. Уравнения самосогласованного поля Лекция 4. Метод молекулярных орбиталей
3-я неделя	Лекция 5. Неограниченный метод Хартри-Фока Лекция 6. Теория функционала плотности
4-я неделя	Лекция 7. Расчет возбужденных состояний Лекция 8. Структура квантово-химических программ
Апрель 1-я неделя	Практикум (6 занятий по 2 часа, компьютерный класс в Институте катализа СО РАН).

4.а Программа курса лекций

Электронный гамильтониан.

Законы сохранения в квантовой механике. Уравнение Шредингера. Гамильтониан N -электронной системы. Электронная энергия. Полная энергия молекулы. Полный гамильтониан. Приближение Борна-Оппенгеймера. Поверхность потенциальной энергии. Переходное состояние.

Волновая функция многоэлектронной системы.

Принцип неразличимости частиц в квантовой механике. Симметрия электронной волновой функции. Понятие пространственной и спин-орбитали. Принцип Паули. Слейтеровский детерминант. Матричные элементы одно- и двухэлектронной части электронного гамильтониана в базисе детерминантных функций. Кулоновский и обменный интеграл. Энергия однодетерминантного состояния.

Уравнения самосогласованного поля (ССП).

Вариационный принцип. Минимизация энергии однодетерминантной волновой функции. Кулоновский и обменный оператор. Уравнения Хартри-Фока.

Матричная форма уравнений.

Разложение молекулярных орбиталей в линейную комбинацию базисных (атомных) орбиталей (приближение МО ЛКАО). Базисные орбитали слейтеровского и гауссова типа. Уравнения СПП в базисе атомных орбиталей (уравнения Рутана). Анализ заселенностей. Маллиkenовские заряды и спиновые плотности.

Неограниченный метод Хартри-Фока.

Спин-поляризованный детерминант. Уравнения Попла-Несбета. Среднее значение оператора S^2 для однодетерминантной функции. Анализ спиновой плотности.

Теория функционала плотности.

Теорема Коэнберга-Кона. Уравнения Кона-Шэма. Обменно-корреляционные функционалы.

Расчет возбужденных состояний.

Метод конфигурационного взаимодействия (CI). Зависящая от времени теория функционала плотности (TDDFT).

Структура квантово-химических программ.

Итерационный метод решения уравнения самосогласованного поля. Блок-схема программ. Обзор программных продуктов для молекулярного моделирования.

46 Практикум

Занятие 1. Ознакомление с пакетом Gaussian-09, веб-интерфейсом WebMO. Построение структур молекул в пакете WebMO.

Занятие 2. Запуск на счет простейших задач для расчета молекул с закрытой оболочкой (H_2O , CH_4 и т.п.): расчет при фиксированной геометрии, оптимизация, расчет колебательного спектра.

Занятие 3. Расчет теплот простых реакций

Занятие 4. Расчет энергий активации простых реакций (например, инверсия аммиака)

Занятие 5. Расчет молекул с открытой оболочкой неограниченным (спин-поляризованным) методом

Занятие 6. Расчет простых комплексов металлов спин-поляризованным методом

5. Образовательные технологии

Виды/формы образовательных технологий

Лекции проводятся с иллюстрацией расчетов в пакете Gaussian в режиме «on line». Лекции включают элементы семинарских занятий. В ходе таких занятий предлагаются качественные задачи, разбираемые всей аудиторией.

Практические занятия проводятся в компьютерном классе ИК СО РАН.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

При прохождении курса «квантово-химические методы в катализе» каждый студент обсуждает ход практических занятий с преподавателем. В ходе этого общения выявляются сложные для понимания моменты, которые могут стать предметом дополнительного семинара. После прохождения практики каждый студент выполняет небольшой проект по расчету модельной каталитической реакции на основе переходного металла. Перед сдачей экзамена каждый студент обсуждает с преподавателем результаты практикума. При отсутствии результатов студент не допускается к экзамену.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Литература

Мак-Вини Р., Сатклиф Б. *Квантовая механика молекул*. - М.: Мир, 1972.

Счастнев П.В. *Теория электронных оболочек молекул*. - НГУ, Новосибирск, 1973.

Фудзинага С. *Метод молекулярных орбиталей*. - М.: Мир, 1983.

Szabo A., Ostlund N.S. *Modern quantum chemistry*. - Dover, Mineola, New York, 1996

Кон В. «Электронная структура вещества — волновые функции и функционалы плотности» (нобелевская лекция) *Успехи Физ. Наук*, 172 336 (2002)

Gaussian 09. User's Reference. online version

http://gaussian.com/g_tech/g09ur.htm

Цирельсон В.Г. *Квантовая химия* – М.Бином. 2012.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Персональные компьютеры с необходимым ПО (12), в учебном классе, мультимедийный проектор, ноутбуки, экраны.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и с ОС ВПО, принятым в ФГАОУ ВО Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, с учетом рекомендаций ООП ВПО по направлению «020100 ХИМИЯ».

Автор:

Зильберберг Игорь Леонидович, д.х.н., доцент кафедры адсорбции и катализа ФЕН, зав. лаб. ИК СО РАН



подпись

Программа одобрена на заседании кафедры адсорбции и катализа "21" апреля 2014 г.

Секретарь кафедры к.х.н., ассистент  И.В.Делий