

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный
университет» (Новосибирский государственный университет, НГУ)

Факультет естественных наук

СОГЛАСОВАНО

Декан ФЕН

Резников В. А.


Подпись

5 октября 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В КАТАЛИЗЕ

направление подготовки: 04.04.01 Химия

направленность (профиль): Химия

Форма обучения: очная

Разработчик:
д.х.н. Зильберберг И.Л.

Зав. каф. катализа и адсорбции
академик Бухтияров В.И.

Руководитель программы:
чл.-корр. РАН, проф. Нетесов С.В.

Новосибирск, 2020

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.	3
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.	3
3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.	3
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.	4
5. Перечень учебной литературы.	5
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.	5
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.	6
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.	6
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.	6
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.	7

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Индикатор компетенции	Результаты обучения по дисциплине
М-ОПК-1. Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	
М-ОПК-1.3. Использует современные расчетно-теоретические методы химии для решения профессиональных задач	<ul style="list-style-type: none"> - имеет представление о теории Хартри-Фока и теории функционала плотности DFT и численных методах решения уравнений самосогласованного поля для различных многоэлектронных систем; - имеет опыт расчетов молекул и комплексов в рамках пакета Gaussian; - имеет представление о круге задач в области исследования гетерогенных катализаторов, для которых возможно применение методов квантовой химии;

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина *Квантово-химические методы в катализе* входит в часть образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений (Б1.В.ДВ.1.9), и изучается вы 2 семестре.

Освоение дисциплины *Квантово-химические методы в катализе* базируется на знаниях, умениях и навыках, сформированных у обучающихся по результатам изучения дисциплин Физика, Высшая алгебра, Физическая химия, Неорганическая химия, Строение вещества, Введение в хемоинформатику, и является необходимым для изучения следующих дисциплин и практик: Производственная практика, научно-исследовательская работа.

3. Трудоемкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.

Трудоемкость дисциплины – 23.е. (72 ч)

Форма промежуточной аттестации: 2 семестр – экзамен

№	Вид деятельности	Семестр
		2
1	Лекции, ч	16
2	Практические занятия, ч	12
3	Лабораторные занятия, ч	-
4	Занятия в контактной форме, ч	32
5	из них аудиторных занятий, ч	28
6	в электронной форме, ч	-
7	консультаций, час.	2
8	промежуточная аттестация, ч	2
9	Самостоятельная работа, час.	40
10	Всего, ч	72

Реализация дисциплины включена в практическую подготовку в ИК СО РАН при проведении следующих видов занятий, часть из которых предусматривает участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью:

- лекции;
- практические занятия.

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.

2 семестр
Лекции (16 ч)

Наименование темы и их содержание	Объем, час
Раздел 1. Начальные понятия теории многоэлектронных систем.	
Волновая функция многоэлектронной системы. Симметрия физических систем и типы волновых функций. Понятие пространственной и спин-орбитали. Одно- и многодетер-минантные функции. Полная энергия. Структура поверхности потенциальной энергии.	2
Раздел 2. Уравнения самосогласованного поля.	
Энергия однодетерминантного состояния. Закрытые и открытые оболочки. Варьирование полной энергии – функционала волновой функции. Метод неопределенных множителей Лагранжа. Уравнения Хартри-Фока. Разложение орбиталей по базис-ным функциям. Типы базисов. Уравнения Рутана. Анализ заселенностей. Блок-схема решений уравнений самосогласованного поля в квантово-химических пакетах.	4
Раздел 3. Корреляция электронов.	
Пост-хартрифовские приближения. Матрица электронной плотности 1-го и 2-го порядка (корреляционная функция). Функция корреляционной дырки. Энергия как функционал матриц плотности.	2
Раздел 4. Теория функционала плотности Коэнберга-Кона-Шэма.	
Электронная плотность как фундаментальная переменная. Первая и вторая теорема Ко-энберга-Кона. Уравнения Кона-Шэма.	4
Раздел 5. Обменно-корреляционные функционалы.	
Приближение локальной плотности. Градиентное разложение. Обобщенное градиентное разложение (GGA). Мета-GGA. Гибридные функционалы. Орбитально-зависимые функционалы. DFT+U.	2
Раздел 6. Основы расчетов твердых тел.	
Теорема Блоха. Зоны Бриллюэна. Симметричные точки. Плотность состояний. Базис плоских волн. Псевдопотенциалы. Метод присоединенных плоских волн. Структура популярных пакетов для периодических DFT расчетов (VASP, ESPRESSO).	2

Практические занятия (12 ч)

Содержание практического занятия	Объем, час
<p>Занятие 1. Расчеты атомов и простых молекул.</p> <p>Для освоения WebMO интерфейса и логики квантово-химических расчетов в молекулярном и периодическом вариантах предлагается проделать PBE/DFT расчеты в пакете Gaussian и VASP(ESPRESSO). Для периодических расчетов в качестве образца используется набор примеров на сайте https://www.vasp.at/wiki/index.php/Atoms_and_Molecules_-_Tutorial</p> <p>Рассматривается система по выбору. Варианты расчета: 1) в одной точке (при заданной геометрии), 2) расчет с релаксацией геометрии, 3) расчет частот колебаний, 4) расчет в спинполяризованном варианте. Подготовка и просмотр решений должна быть параллельно с WebMO проделана в Chemcraft'e.</p>	3

<p><i>Занятие 2.</i> Расчеты 3D структур. Продумать PBE/DFT расчеты в пакете VASP(ESPRESSO) для объемной структуры металла (оксида) с гранецентрированной решеткой (например, Si). Геометрию взять из баз данных (ICSD, Zeolitedatabase) в виде CIF файла. Примеры входных файлов – на сайте https://www.vasp.at/wiki/index.php/Bulk_Systems_-_Tutorial Выполнить расчет с фиксированной геометрией, затем с релаксацией геометрии. Визуализировать результаты в программе VESTA.</p>	3
<p><i>Занятие 3.</i> Расчеты поверхностей. Выполнить расчет поверхностей металла в программе VASP в модели слэба при фиксированной геометрии и с релаксацией поверхности. Примеры входных файлов – на сайте https://www.vasp.at/wiki/index.php/Surface_Science_-_Tutorial</p>	3
<p><i>Занятие 4.</i> Индивидуальные задачи по выбору. Выполнить расчеты молекулярных систем (Gaussian) или периодических систем (VASP или ESPRESSO) по выбору. Желательно связать расчеты с темой работы в лаборатории.</p>	3

Самостоятельная работа студентов (40 ч)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Самостоятельная работа во время занятий	38
из них:	
изучение теоретического материала, не освещаемого на лекциях	10
подготовка к практическим занятиям.	9
изучение теоретического материала, не освещаемого на лекциях	10
подготовка к практическим занятиям	9
Самостоятельная работа во время промежуточной аттестации	2
из них:	
подготовка к дифференцированному зачету	2

5. Перечень учебной литературы.

5.1. Основная литература

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

5.2. Дополнительная литература

- Цирельсон В.Г. Квантовая химия. – М.: Бином, 2010.

6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующими учебными пособиями:

- Peter Kratzer and Jörg Neugebauer, The Basics of Electronic Structure Theory for Periodic Systems. *Frontiers in Chemistry*, 2019, vol. 7, Article 106.

- Szabo A., Ostlund N.S. Modern quantum chemistry. - Dover, Mineola, New York, 1996
- Parr R., Yang W. Density-functional theory of atoms and molecules. – Oxford Univ. Press, New York, 1989

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

7.1 Ресурсы сети Интернет

Для освоения дисциплины используются следующие ресурсы:

- https://www.vasp.at/wiki/index.php/Lectures_and_presentations
- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.

7.2 Современные профессиональные базы данных:

Не используются.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

8.1 Перечень программного обеспечения

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

веб-интерфейс WebMO на базе вычислительного кластера ИК СО РАН.

8.2. Информационные справочные системы

<https://webbook.nist.gov/chemistry/>

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

Для реализации дисциплины используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной и итоговой аттестации.

2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся.

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется согласно «Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете».

10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

10.1. Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Текущий контроль

Текущий контроль осуществляется в ходе практических занятий путём проверки расчетных заданий для самостоятельного решения на компьютере.

Промежуточная аттестация

Освоение компетенций оценивается согласно шкале оценки уровня сформированности компетенции. Положительная оценка по дисциплине выставляется в том случае, если заявленные компетенции ПК-1 и ПК-2 сформированы не ниже порогового уровня в части, относящейся к формированию способности использовать специализированные знания в области DFT моделирования в профессиональной деятельности.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит на экзамене. Он проводится в конце семестра в устной форме в виде собеседования по результатам практической работы, оформленной по типу курсовой работы. Устные вопросы подбираются таким образом, чтобы проверить уровень сформированности компетенций ПК-1 и ПК-2.

Вывод об уровне сформированности компетенций принимается преподавателем. Каждый вопрос оценивается от 0 до 5 баллов. Положительная оценка ставится, когда все компетенции освоены не ниже порогового уровня. Оценки «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» означают успешное прохождение промежуточной аттестации.

Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Основы теории функционала плотности».

Таблица 10.1

Код компетенции	Индикатор	Результат обучения по дисциплине	Оценочное средство
М-ОПК-3	М-ОПК-3.1. Применяет квантово-химические методы при решении задач химической направленности	<ul style="list-style-type: none">- имеет представление о теории Хартри-Фока и теории функционала плотности DFT и численных методах решения уравнений самосогласованного поля для различных многоэлектронных систем;- имеет опыт расчетов молекул и комплексов в рамках пакета Gaussian;- имеет представление о круге задач в области исследования гетерогенных катализаторов, для которых возможно применение методов квантовой химии.	Экзамен, расчетное задание, практическая работа

Таблица 10.2

Критерии оценивания результатов обучения	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Уровень освоения компетенции			
		Не сформирован (0 баллов)	Пороговый уровень (3 балла)	Базовый уровень (4 балла)	Продвинутый уровень (5 баллов)
1	2	3	4	5	6
Полнота знаний	ПК1.1 ПК2.1	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имеют место грубые ошибки.	Минимально допустимый уровень знаний. Допускается значительное количество негрубых ошибок.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Допускается несколько негрубых/несущественных ошибок. Не отвечает на дополнительные вопросы.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Свободно и аргументированно отвечает на дополнительные вопросы.
Наличие умений	ПК1.2 ПК2.2	Отсутствие минимальных умений. Не умеет решать стандартные задачи. Имеют место грубые ошибки.	Продемонстрированы частично основные умения. Решены типовые задачи. Допущены негрубые ошибки.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания с негрубыми ошибками или с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания в полном объеме без недочетов и ошибок.
Наличие навыков (владение опытом)	ПК1.3 ПК2.3	Отсутствие владения материалом по темам/разделам дисциплины. Нет навыков в решении стандартных задач. Наличие грубых ошибок.	Имеется минимальный набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач без ошибок и недочетов. Продемонстрированы знания по решению нестандартных задач.

Типовые контрольные задания и материалы, необходимые для оценки результатов обучения

Примеры заданий для самостоятельного решения

1. Определить в расчетах потенциал ионизации молекулы (выбранной студентом) по теореме Купманса и методом дельта-ССП.
2. Определить в расчетах степень подмешивания спиновых контаминантов в неограниченном решении для выбранной молекулы-радикала или комплекса переходного металла.
3. Определить энергию активации процесса «выворачивания» молекулы NH_3
4. В периодическом расчете определить геометрическую и электронную структуру нити C_n
5. В периодическом расчете определить структуру графена

Примерные вопросы на экзамене

На проверку сформированности компетенции ПК-1:

1. Качественно объяснить, почему уравнения Хартри-Фока или Кона-Шэма решаются только итерационным способом.
2. Оценить в расчетах величину энергии межэлектронного отталкивания произвольной системы (на выбор).

На проверку сформированности компетенции ПК-2:

1. Чему равна вероятность найти электрон атома водорода точно на ядре
2. Показать аналитически в приближении Хартри-Фока, что электроны с параллельными спинами избегают друг друга.

Оценочные материалы по промежуточной аттестации, предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям СУОС, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.

**Лист актуализации фонда оценочных средств
по дисциплине «Квантово-химические методы в катализе»**

№	Характеристика внесенных изменений (с указанием пунктов документа)	Дата и № протокола Учёного совета ФЕН	Подпись ответственного