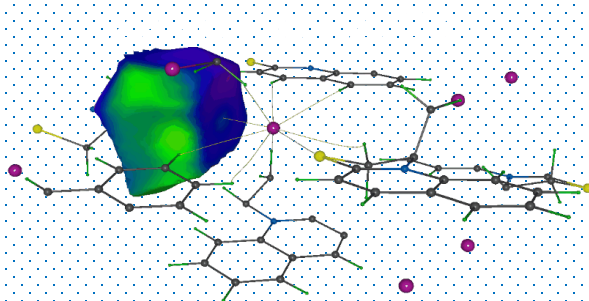




*Российский химико-технологический университет
им. Д.И. Менделеева*

**Отчет по учебно-методической
и научной работе кафедры
квантовой химии за 2021-2023 г.г.**



Профессорско - преподавательский состав:

профессоров, докторов наук - 1,

доцентов, канд. наук - 2

ассистент – 1 б/с (0,7ст).

Средний возраст – 60 лет

Средний по кафедре балл по опросу студентов : 2021/2023 ~ 4,1 балла

Учебно-вспомогательный состав - 3 чел.

Зав. лаб. – 0,5 ст.

Специалист по учебно-методической работе- 0,5 ст.

Инж. - программист – 0,25 ст.

Повышение квалификации ППС в 2021-2023 гг - 4 чел.

(получено 31 удостоверение и диплом о переподготовке)



Структура базового курса квантовой химии:

(Лекции – 32 /16 час., Практические занятия – 48 / 16 час.)

- Многоэлектронный атом
 - Методы квантовой химии молекул
 - Химическая связь и межмолекулярные взаимодействия
 - Квантовая химия реакций

Курс мультимедийный (регулярно обновляется)

Учебные материалы, гипергlossарий основных понятий квантовой химии и система тестовых заданий для самопроверки знаний помещены в интернет:

<http://quant.hostronavt.ru>

В 2021-2023 г.г. кафедра вела следующие дисциплины:

- **«Квантовая химия»** для специальностей «Фундаментальная и прикладная химия» (лекции - 32 часа, практические занятия – 48 часов), «Химическая технология материалов современной энергетики» (лекции – 16 часов , практические занятия –16 часов) , для бакалавров по направлению подготовки «Химия» (лекции - 32 часа, практические занятия – 48 часов) и магистров по направлению подготовки «Наноинженерия» (лекции - 17 часов, практические занятия -17 часов)

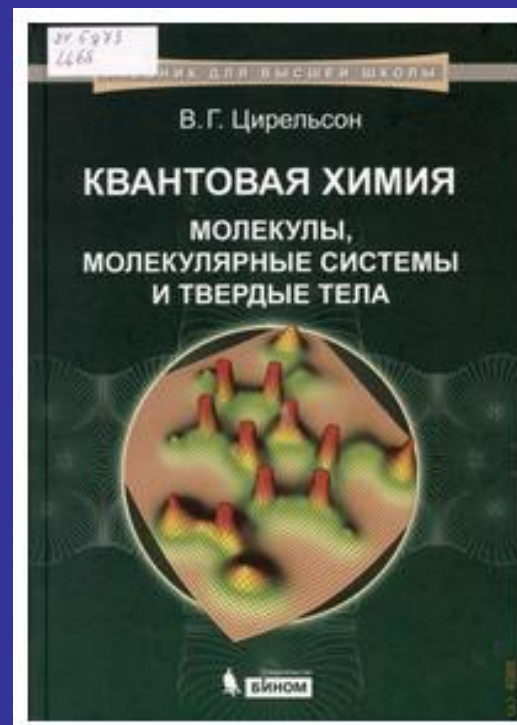
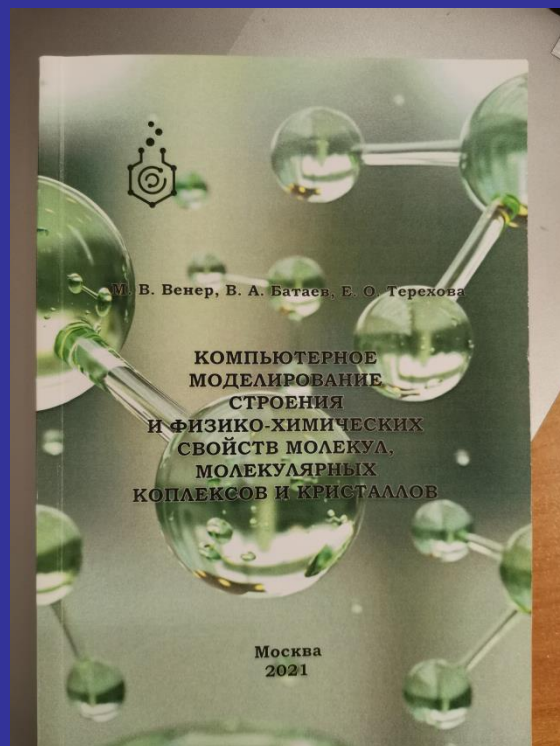
- **«Основы квантовой химии»** для специальности «Химическая технология энергонасыщенных материалов и изделий» (лекции – 16 часов , практические занятия –16 часов) и для бакалавров по направлению подготовки «Химическая технология» (16/16),

-**«Вычислительные методы в химии»** для специальности «Фундаментальная и прикладная химия» и бакалавров по направлению подготовки «Химия» (16/ 32)

Разработаны рабочие программы , оценочные средства и методические указания для всех дисциплин.

Курсы полностью обеспечены учебно-методическими материалами.

Учебное пособие и учебник, изданные в 2021-23 гг



2022/23 уч. год

Учебные группы

Основы квантовой химии

Группы: О-21, 22, 23, 24, 25, 26, 27; Н-21, 23, 25; ПР-20; И-33, 35 (16/16)

Квантовая химия

Группы: Ф-52, 55, 56, 57 (16/16); Ф-22, 25, 26, 27 (16/16); О-38, 39 (32/48);
ЕН-31, 32 (32/48); МК-15 (17/17); ЗДО-31,32, 33 (4/4)

Всего часов: 2924 (аудиторных 2426).

Всего студентов 744; из них бакалавров 398 (групп 16);
специалистов 336 (групп 11);
магистров 10 (групп 1).

Средний балл на экзаменах / дифф. зачетах в 2022/23 уч. году - 4,3

Материальная база кафедры:

- 1 компьютерный класс,
- 6 компьютеров для учебного процесса,
- вычислительный кластер (два 4-ядерных процессора),
- 4 компьютера для работы ППС,
- оргтехника.

Лицензионное специализированное программное обеспечение:

- Firefly/GAMESS,
- CRYSTAL17/TOPOND,
- CPMD,
- MultiWFN,
- WinXPRO.

Практические занятия в компьютерном классе, ауд. 523, и семинар в ауд. 453



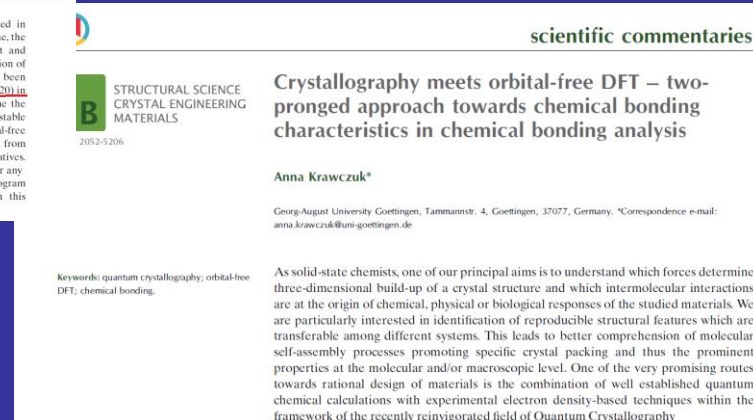
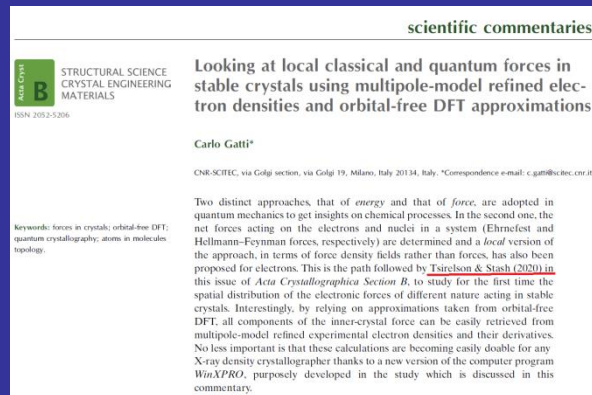
Научная работа

Общее научное направление :

«Исследование структурной обусловленности электронных свойств молекул, молекулярных систем и кристаллов».

Новое направление: «Неорбитальная квантовая кристаллография» -

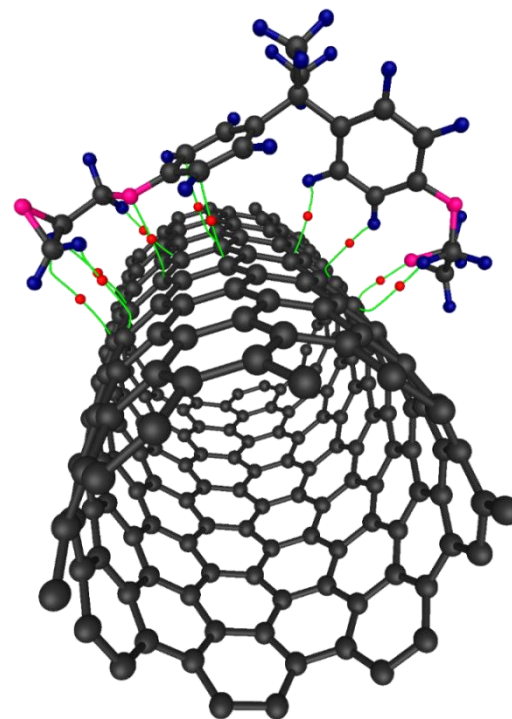
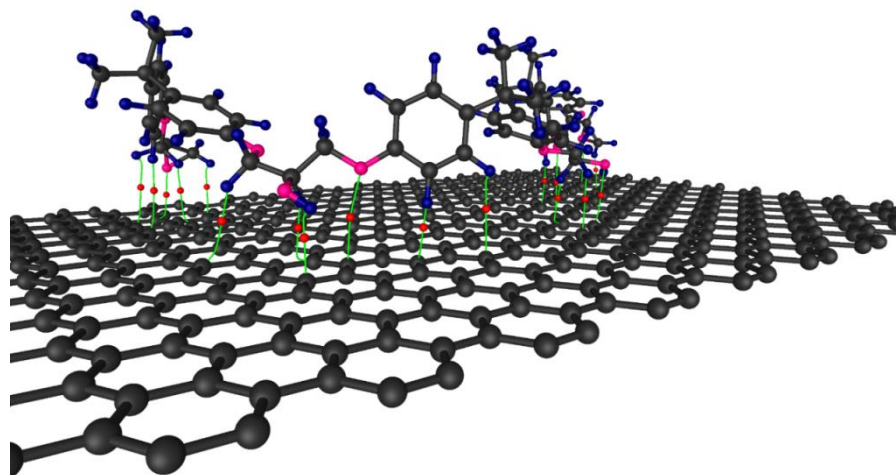
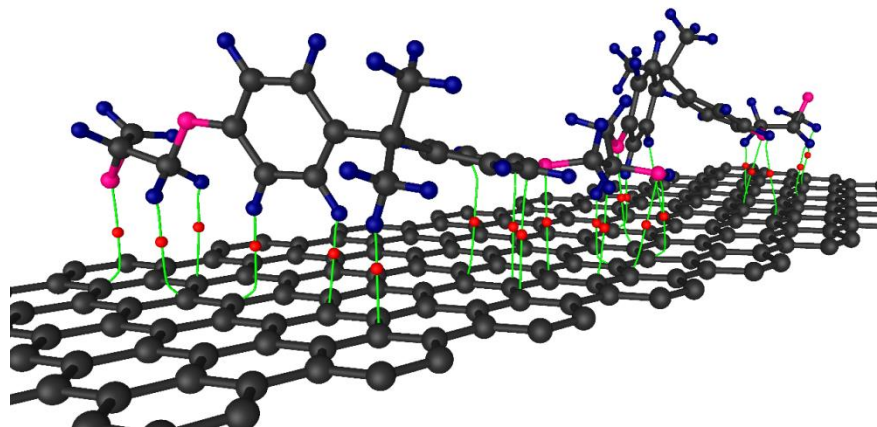
• позволяет разделить, используя одноэлектронное уравнение Эйлера, **электростатические и обменные потенциалы и потенциалы Вайцзеккера и Паули**. С их помощью определяются локальные гомотропные и гетеротропные силы, действующие на электрон. Все эти характеристики выражаются через электронную плотность и ее производные и применяются для изучения электронных эффектов в молекулах и кристаллах.



Гранты: РФФИ – 1 (1 млн. руб.),

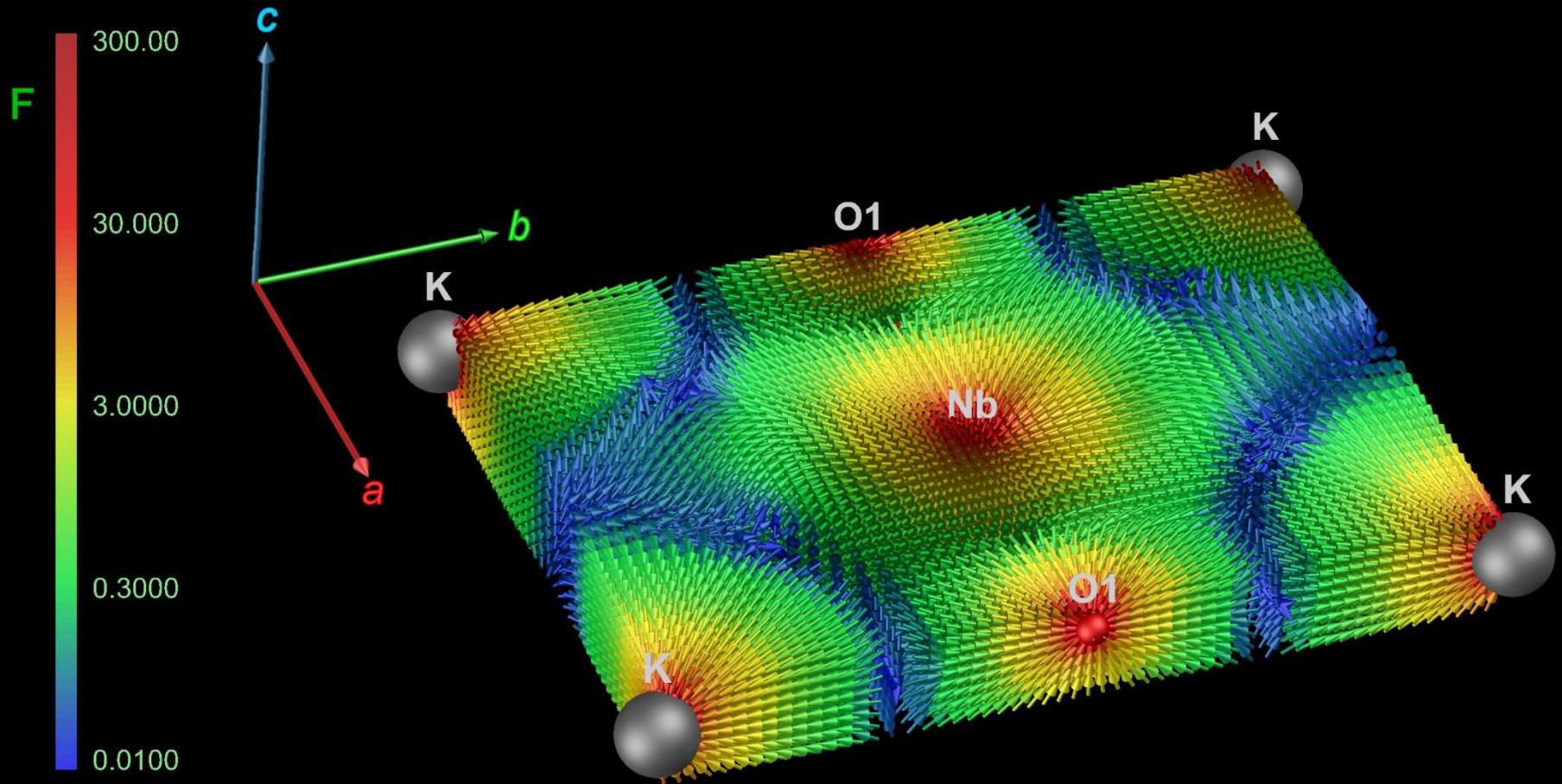
2023 Подана заявка в РФФ

Атомно-молекулярные системы на основе углеродных материалов

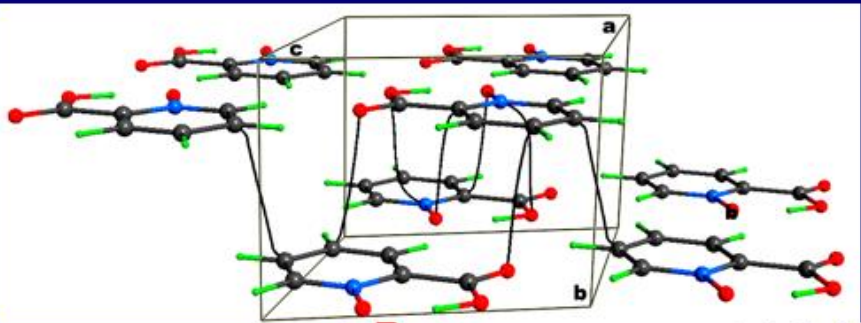


Атомы кислорода эпоксидных и эфирных групп и эпоксидных смол формируют типичные тетраэдрные связи TtB с атомами С на поверхности углеродных материалов.

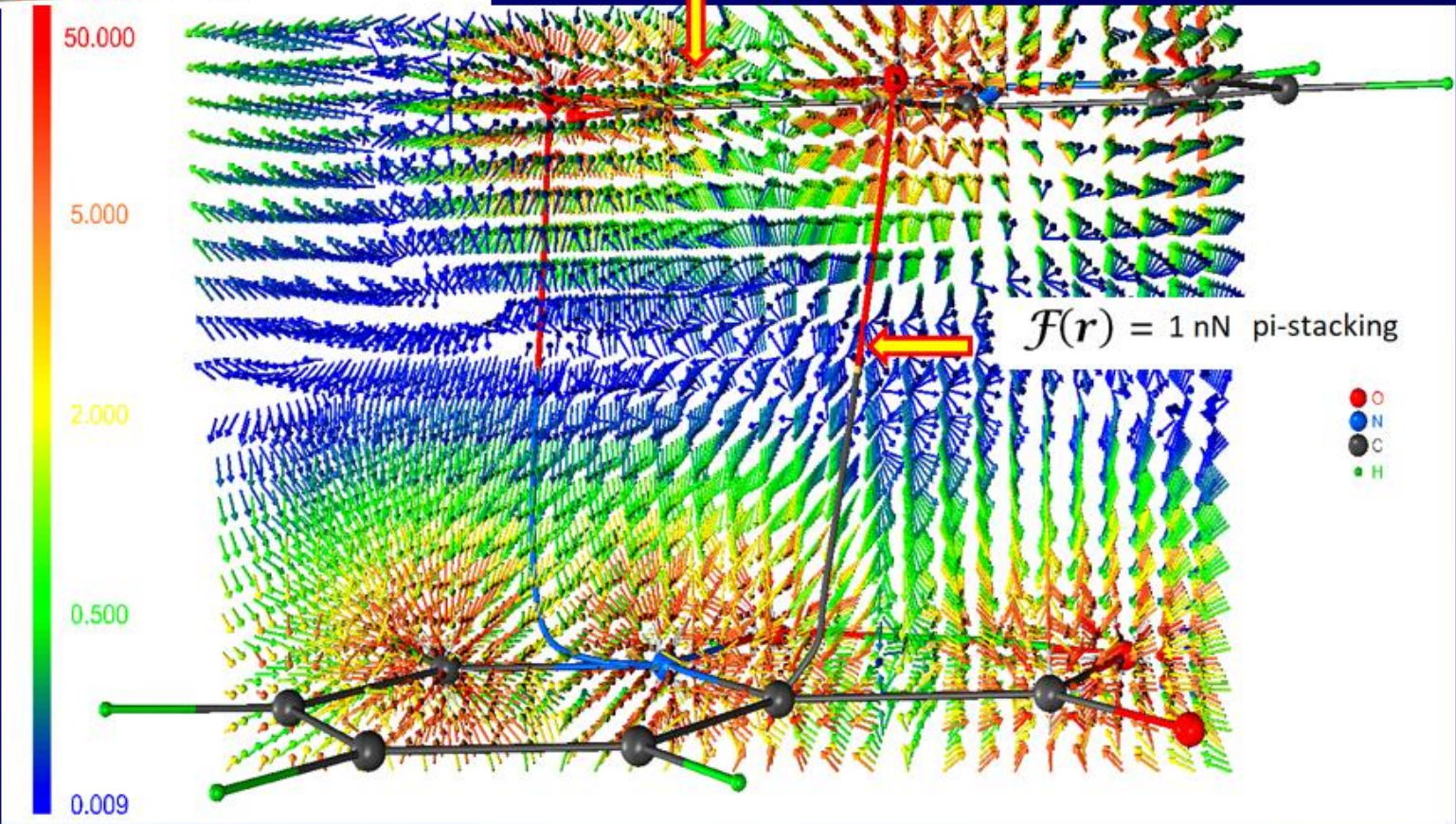
Примеры приложений: распределение
внутрикристаллических сил в KNbO_3



The static force field in crystalline picolinic acid N-oxide, $C_6H_5NO_3$: π -stacking



$\mathcal{F}(r) = 5 \text{ nN}$ covalent bond



Публикационная активность ППС за 2021-2023 гг:

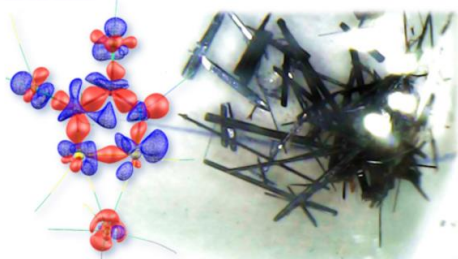
- Учебник:	1
- Монографии:	1
- Учебное пособие:	1
- Глава в книге	1
- Статьи в журналах в РФ и за рубежом :	33 (из них 18 Q1/Q2)
Доклады на конференциях :	
Всего	54
Из них пленарных	34
Публикации со студентами :	34
	(7 статей и 27 докладов)

Информация о работах кафедры в СМИ

<https://www.susu.ru/ru/news/2021/10/15/rossiyskie-uchenye-pervymi-v-mire-izuchili-elektromnyu-plotnost-v-kristallah-soli>

Российские ученые первыми в мире изучили электронную плотность в кристаллах соли Апшеля

15.10.2021



Д.ф.-м.н., профессор **Владимир Цирельсон**, стоящий у истоков научного направления квантовой кристаллографии, разрабатывает теорию, которая позволяет заглянуть на субатомный уровень строения



Цирельсон Владимир Григорьевич | Москва | Профессор РХТУ

Москва | Выберите рубрику

Главное | Архив | Источники | Погода | Коронавирус | Происшествия | Пожары | На воде

Профессор РХТУ получил звание «Заслуженный деятель науки Российской Федерации»

Президент России Владимир Путин присвоил почётное звание «Заслуженный деятель науки Российской Федерации» профессору РХТУ Владимиру Цирельсону. Об этом сегодня сообщила пресс-служба высшего учебного заведения.

«Владимир Цирельсон — крупный ученый и кристаллохимии и прецизионного рентгеноструктур; посвящены изучению химической связи, теплового движения атомов и малых ионов, оптических, спектральных и динамических свойств молекул РХТУ.

Учёный продолжает заниматься как научной, так и преподавательской и кандидатом и одного доктора наук. Владимир Цирельсон автор и соавтор монографий. Профессор является экспертом Министерства науки и Российской Академии Наук, а также лауреатом международной и Гумбольдта.

Источник: Район Северное Тушино СЗАО 11.08.2022 20:13

Ещё новости о событии:

Профессор РХТУ получил звание «Заслуженный деятель науки Российской Федерации»

Президент России Владимир Путин присвоил почётное звание «Заслуженный деятель науки Российской Федерации» профессору РХТУ Владимиру Цирельсону.

11.08.2022 Район Северное Тушино СЗАО - Москва

Профессору РХТУ присвоили почётное звание «Заслуженный деятель науки Российской Федерации»

Президент России Владимир Путин присвоил почётное звание «Заслуженный деятель науки Российской Федерации» профессору РХТУ Владимиру Цирельсону.

11.08.2022 Район Северное Тушино СЗАО - Москва

Найти в Дзене

РХТУ имени Д.И. Менделеева
186 подписчиков

Подписаться

«Планируем сделать теорию реальностью»: профессор РХТУ Владимир Цирельсон рассказал о полувековом развитии собственной научной школы

Сегодня

Экспериментальная база химии быстро развивается, и нетривиальной задачей становится трактовка информации о деталях структуры и ее возможных изменениях. Такого мнения придерживается Владимир Григорьевич Цирельсон — доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой квантовой химии РХТУ им. Д.И. Менделеева, известный ученый в области квантовой химии, кристаллохимии и прецизионного рентгеноструктурного

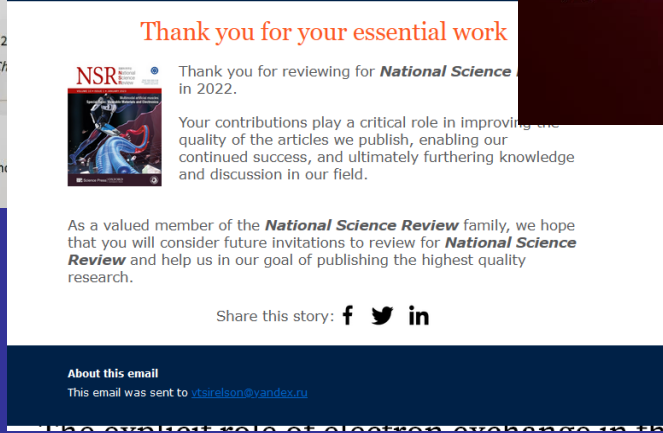
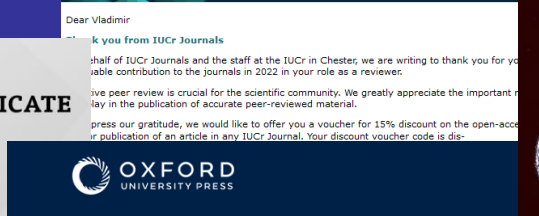
Награды и дипломы за 2021-2023 гг

- Сертификаты Wiley, IUCr, Oxford Univ. Press -

5

- Дипломы и почетные грамоты -

6



Сотрудничество с подразделениями РХТУ и организациями

РХТУ, ИПУР

Работа с бакалаврами и магистрами по теме

«Зеленая химия для устойчивого развития: от фундаментальных принципов к новым материалам»

(Сетевой Менделеев-Центр)

ИТ Департамент РХТУ

*Суперкомпьютер
«Менделеев»*

Хим. Фак МГУ, ФИЦ Биотехнологии РАН

*Механизмы действия
лекарственных средств,
Квантовая кристаллография*

ЮУрГУ(НИУ)

*Нековалентные связи
Квантовая
кристаллография*

Институт органической и физической химии им. Арбузова, Казань

*Квантовая
кристаллография*

**Кафедра
квантовой
химии**

НГУ, Новосибирск

*Управление свойствами
элементов живых систем
путем внешних воздействий*

ИОНХ РАН

*Межмолекулярные
взаимодействия,
Квантовая
кристаллография*

Представительство кафедры в экспертных и научных советах

Учёный совет РХТУ	1
Ученый совет ИПУР	2
Конкурсные комиссии РХТУ	1
Методическая комиссия РХТУ	1
Диссертационные советы (РХТУ, МИТХТ)	2
Экспертиза РФФИ, РНФ, Премия Сбера, Реестр экспертов РФ, международные научные фонды	1
Экспертиза Минобрнауки РФ	1
Оппонирование диссертаций	7

Под руководством ППС кафедры защищена 1 магистерская (РХТУ) и 1 кандидатская диссертации (совет МФТИ)



Перспективы развития кафедры

Кафедра ставит целью активное участие в образовательном и исследовательском процессе подготовки конкурентоспособных бакалавров, магистров, специалистов, аспирантов и докторантов, обладающих углубленной фундаментальной подготовкой, отвечающей уровню развития химии и химической технологии, опережающему мировой.

Темы научных исследований : «Квантовая Кристаллография» и «Вычислительная зеленая химия»

Для этого планируется:

- *Непрерывная актуализация учебных курсов по принципу «Образование на базе науки»;*
- *Обновление компьютерных и программных ресурсов кафедры;*
- *Развитие новых методов квантовой кристаллографии и оригинальной компьютерной программы WinXPRO*

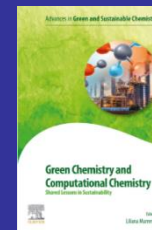
Недостатки и трудности в работе кафедры

- Необходимо омоложение профессорско-преподавательского состава.
- Компьютерное оборудование кафедры требует срочного обновления.
- В ауд. 523, 451 и 453 (Миусский комплекс) требуется замена окон.
- Необходимо списание вышедшего из строя оборудования.



Результативность учебно-методической и научной работы заведующего кафедрой (2021-2023 гг)

- Учебник с грифом УМО, 5-е издание **1**
- Глава в книге **1**
- Статьи в российских и зарубежных журналах **26** (из них 16 Q1-Q2)
- Индекс цитируемости / Хирш-фактор (Scopus): **4932 /36**
- Доклады на научных конференциях **18** (устн. 8)
- Руководство дисс. работами **1** канд
- Оппонирование диссертаций: **4**
- Экспертная работа: Реестр экспертов РФ, РНФ, РФФИ, Премия Сбера
- Членство в международных комиссиях и оргкомитетах: **1**
- Членство в диссертационных советах (РХТУ, МИТХТ): **2**



Спасибо за внимание!