



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

Отчет по учебно-методической и научной работе кафедры квантовой химии за 2016-2020 г.г.

25 ноября 2020 г.



Образование на базе науки

Профессорско - преподавательский состав:

профессоров, докторов наук - 2 ;

доцентов, канд. наук - 2

Средний возраст – 64 года

Средний по кафедре балл по опросу студентов : 2016/2020 ~ 4 балла

Повышение квалификации ППС в 2016-2020 гг - 4 чел.

(получено 16 удостоверений)

Учебно-вспомогательный персонал - 2 чел.

Зав. лаб. – 1 ст.

Вед. программист – 0,2 ст.

Структура базового курса квантовой химии:

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

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

Курс мультимедийный и регулярно обновляется

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

<http://quant.hostronavt.ru>

В 2016-2020 г.г. кафедра вела следующие дисциплины:

- «Квантовая химия» для специальностей «Фундаментальная и прикладная химия», «Химическая технология материалов современной энергетики» (лекции – 32 часа, практические занятия –16 часов) и магистров по направлению подготовки «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии» (32/32);
- «Основы квантовой химии» для бакалавров по направлениям подготовки «Химия» (32/16) и «Химическая технология» (16/16),
- «Вычислительные методы в химии» для специальности «Фундаментальная и прикладная химия» и бакалавров по направлению подготовки «Химия» (16/ 16)
- «Фундаментальные основы моделирования электронных свойств функциональных материалов" для слушателей Института профессионального развития РХТУ им. Д.И. Менделеева (16 уч. часов).

Разработаны рабочие программы, оценочные средства и методические указания для всех дисциплин. Курсы полностью обеспечены учебно-методическими материалами.

2019/20 уч. год

Учебные группы

Основы квантовой химии (лекц./практич. Занятия; 16/16)

Группы: О-23, 24, 25, 26, 27; Н-21, 22, 23, 24, 25, 26; ТМ-23;
И-33, 35; И-53, 55; ЕН-31 (32/16)

Квантовая химия (32/16)

Группы: О-38; Ф-52,55,56; А-31,32; МК-15 (32/32). ЗДО-31,32. (12/8)

Вычислительные методы в химии (16/16)

Группы: ЕН-31, О-38.

Всего часов: 2796 (аудиторных 1992).

Всего студентов 671; из них бакалавров 371 (групп 16);
специалистов 290 (групп 11);
магистров 10 (групп 1).

Средний балл на экзаменах/дифф. зачетах в 2019/20 уч. году - 4,36

Распределение нагрузки по годам (ППС - 4)

Учебный год	Часы	Кол-во групп	Кол-во студентов
2016-17	3084	34	638
2017-18	3392	40	788
2018-19	2665	29	638
2019-20	2796	30	671
2020-21	3133	30	708

Новые профили подготовки и магистерские программы, которые запланированы (лекции/практические занятия):

для поступивших в 2019 г.

1. Направление подготовки 18.03.01 «Химическая технология»

Профиль подготовки – «Технология синтетических биологически активных веществ, химико-фармацевтических препаратов и косметических средств» (для иностранных обучающихся, срок обучения 4 года, форма обучения **заочная – Ташкент**) (4/4)

2. Направление подготовки 18.03.01 «Химическая технология»

Профиль подготовки – «Технология синтетических биологически активных веществ, химико-фармацевтических препаратов и косметических средств» (для иностранных обучающихся, срок обучения 4,5 года, форма обучения **заочная – Ташкент**) (4/4)

Распределение нагрузки по годам (ППС - 4)

Учебный год	Часы	Кол-во групп	Кол-во студентов
2016-17	3084	34	638
2017-18	3392	40	788
2018-19	2665	29	638
2019-20	2796	30	671
2020-21	3133	30	708

Новые профили подготовки и магистерские программы, которые запланированы (лекции/практические занятия):

для поступивших в 2020 г.

1. Направление подготовки 04.03.01 «Химия»

Профиль подготовки – «Органические и гибридные материалы для преобразования и запасания энергии» (32/32)

2. Направление подготовки 18.03.01 «Химическая технология»

Профиль подготовки – «Химическая технология биоматериалов» (16/16)

3. Направление подготовки – 28.04.02 «Наноинженерия»

Магистерская программа – «Материалы и технологии наноинженерии» (17/17)

4. Направление подготовки 18.03.01 «Химическая технология»

Профиль подготовки – «Технология синтетических биологически активных веществ, химико-фармацевтических препаратов и косметических средств» (для иностранных обучающихся, срок обучения 4 года, форма обучения очная – Ташкент) (16/16)

Материальная база кафедры

- 2 компьютерных класса,
- 8 компьютеров для учебного процесса,
- вычислительный кластер (4 двухъядерных процессора)
- оргтехника

Лицензионное специализированное программное обеспечение:

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

Научная работа

Общее научное направление :

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

Гранты: РФФИ – 4.

Финансирование НИР кафедры квантовой химии в 2016-2010 гг. (млн. руб.)

Источник	2016	2017	2018	2019	2020
РФФИ	0,95	0,50	1.40	1,70	1,70
Всего					6,25

Научные публикации ППС за 2016-2020 гг:

- Учебник: 1
- Монографии: 2
- Обзоры : 1
- Статьи в журналах в РФ и за рубежом (85% Q1|Q2): 50

Доклады на конференциях :

Всего 72

Из них пленарных 34

Публикации со студентами : 34

Из них 7 статей и 27 докладов

Под руководством ППС кафедры защищены 7 бакалаврских работ, 6 магистерских, 1 кандидатская и 1 докторская диссертации.

Награды и дипломы за 2016-2020 гг

- Сертификаты Elsevier, Springer, RCS

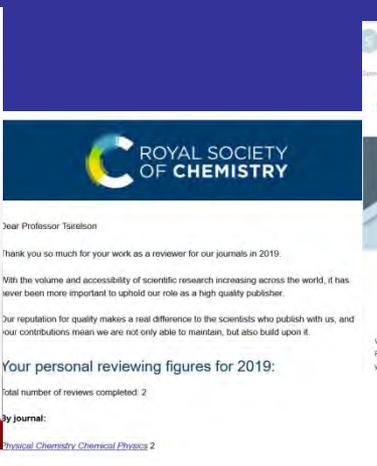
5

- Дипломы и почетные грамоты студентов и аспирантов за научные работы на отечественных и международных конференциях

10

- Премия им. Ломоносова (молодежная)

1



Сотрудничество с другими подразделениями РХТУ и организациями

ИОНХ РАН

Межмолекулярные взаимодействия
(Чураков, Приходченко)

ЮУрРГУ(НИУ)

Нековалентные связи
(Барташевич)

ИХР РАН и ИГХТУ; Иваново

Создание хорошо растворимых многокомпонентных молекулярных кристаллов; учебные пособия
(Перлович, Белова)

**Кафедра
квантовой
химии**

Хим. Фак МГУ, ФИЦ Биотехнологии РАН

Механизмы действия лекарственных средств
(Хренова, Немухин)

Университеты Индии, Турина и Милана (Италия), Северной Каролины (США), Европейский Теоретический Центр по Спектроскопии, Отдел физики материалов (Испания)

РХТУ (ИПУР, ХФТ)

Работа с бакалаврами и магистрами по теме «Вычислительная зеленая химия»
(Тарасова, Межуев, Киенская)

Представительство кафедры в экспертных и Научных советах Минобрнауки, РАН и РФФИ

Учёный совет РХТУ	1
Ученый совет ИПУР	2
Конкурсные комиссии РХТУ	2
Диссертационные советы (РХТУ, МИТХТ)	2
Секция кристаллохимии (Научный совет РАН по хим. строению и реакц. способности)	1
Эксперты ВАК, РФФИ и РФ	2
Экспертиза Минобрнауки РФ	1
Оппонирование диссертаций	7

Перспективы развития кафедры

Кафедра ставит целью позиционирование в качестве координатора инновационного образовательного и исследовательского консорциума, обеспечивающего подготовку конкурентоспособных в мировой шкале бакалавров, магистров, специалистов, аспирантов и докторантов, обладающих углубленной фундаментальной подготовкой, отвечающей передовому уровню развития химии и химической технологии.

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

Для достижения этой цели планируется:

- Непрерывное развитие учебных курсов по принципу «Образование на базе науки»;*
- Расширение компьютерных и программных ресурсов кафедры;*
- Создание сетевого консорциума «Квантовая кристаллография и вычислительная зеленая химия» с привлечением международного сотрудничества;*
- Создание института пост-доков;*
- Развитие оригинальной компьютерной программы WinXPRO*

Результативность учебно-методической и научной работы заведующего кафедрой в 2016-2020 гг.

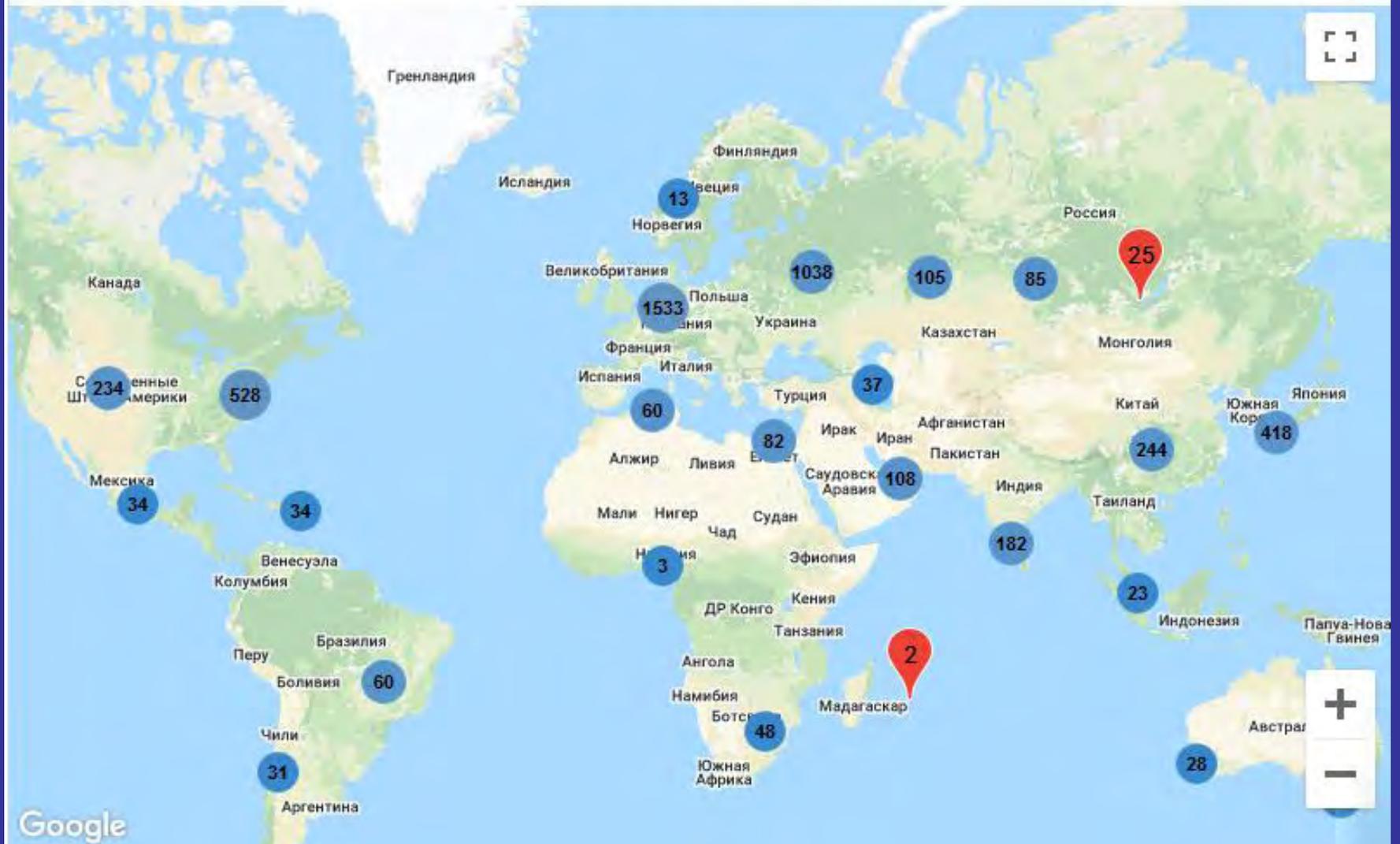


- Учебник с грифом УМО, 4-е издание: **1**
- Учебные пособия **2**
- Новые курсы для Ин-та Профразвития **1**
- Средний балл по опросу студентов **4.45**
- Научн. статьи в реферируемых и зарубежных (Q1/Q2) журналах: **27**
- Индекс цитируемости / Хирш-фактор (Scopus): **3674 / 32**
- Доклады на научных конференциях: **47 (устн. 23)**
- Руководство дисс. работами **1 докт**
- Оппонирование диссертаций: **6 (2 докт.)**
- Экспертная работа: Минобрнаука, Реестр экспертов РФ, РНФ, РФФИ
- Членство в международных оргкомитетах: **3**
- Членство в диссертационных советах (РХТУ, МИТХТ): **2**

Citation map

For Vladimir G Tsirelson

Web of Science Core Collection





Vladimir Tsirelson

ПОДПИСКА ОФОРМЛЕНА

Mendeleev University, Quantum Chemistry Department

Подтвержден адрес электронной почты в домене muctr.ru

[Chemical bond](#) [electron density](#) [properties of molecules and ...](#)

НАЗВАНИЕ



ПРОЦИТИРОВАНО

ГОД

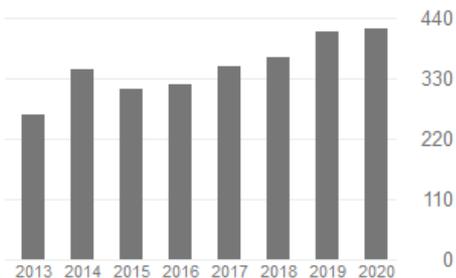
- | <input type="checkbox"/> | НАЗВАНИЕ | ПРОЦИТИРОВАНО | ГОД |
|--------------------------|---|---------------|------|
| <input type="checkbox"/> | Electron density and bonding in crystals: Principles, theory and X-ray diffraction experiments in solid state physics and chemistry
VG Tsirelson, RP Ozerov
CRC Press | 319 | 1996 |
| <input type="checkbox"/> | The chemical bond and atomic displacements in SrTiO3 from X-ray diffraction analysis
YA Abramov, VG Tsirelson, VE Zavodnik, SA Ivanov, ID Brown
Acta Crystallographica Section B: Structural Science 51 (6), 942-951 | 284 | 1995 |
| <input type="checkbox"/> | WinXPRO: a program for calculating crystal and molecular properties using multipole parameters of the electron density
A Stash, V Tsirelson
Journal of applied crystallography 35 (3), 371-373 | 266 | 2002 |
| <input type="checkbox"/> | Multipole analysis of the electron density in triphylite, LiFePO4, using X-ray diffraction data
VA Streltsov, EL Belokoneva, VG Tsirelson, NK Hansen
Acta Crystallographica Section B: Structural Science 49 (2), 147-153 | 224 | 1993 |
| <input type="checkbox"/> | Intermolecular hydrogen bond energies in crystals evaluated using electron density properties: DFT computations with periodic boundary conditions
MV Vener, AN Egorova, AV Churakov, VG Tsirelson
Journal of Computational Chemistry 33 (29), 2303-2309 | 214 | 2012 |
| <input type="checkbox"/> | Topological definition of crystal structure: determination of the bonded interactions in solid molecular chlorine
VG Tsirelson, PF Zhou, TH Tang, RFW Bader
Acta Crystallographica Section A: Foundations of Crystallography 51 (2), 143-153 | 197 | 1995 |
| <input type="checkbox"/> | Determination of the electron localization function from electron density
V Tsirelson, A Stash
Chemical physics letters 351 (1-2), 142-148 | 174 | 2002 |
| <input type="checkbox"/> | Atoms-in-molecules study of intra-and intermolecular bonding in the pentaerythritol tetranitrate crystal
EA Zhurova, AI Stash, VG Tsirelson, VV Zhurov, EV Bartashevich, ...
Journal of the American Chemical Society 128 (45), 14728-14734 | 119 | 2006 |

Прочитано

[ПРОСМОТРЕТЬ ВСЕ](#)

Все Начиная с 2015 г.

	Все	Начиная с 2015 г.
Статистика цитирования	4948	2192
h-индекс	37	26
i10-индекс	92	56



Соавторы

[ИЗМЕНИТЬ](#)

Нет соавторов

Спасибо за внимание!