

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)**  
**Современные методы квантовой химии-2**

**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) **Современные методы квантовой химии-2**
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>ОПК-1.С.</b> Способность решать современные проблемы фундаментальной и прикладной химии, используя методологию научного подхода и систему фундаментальных химических понятий и законов	<b>Владеть:</b> навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения
<b>СПК-1.С.</b> Способность использовать теоретические основы современных физико-химических методов исследования и анализа систем различной природы при решении практических задач	<b>Уметь:</b> применить теоретические основы современных физико-химических методов при анализе и представлении материала научного сообщения на заданную тему
<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> возможности и ограничения расчетных методов квантовой химии при решении практических задач

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 2 зачетных единицы, всего 72 часа, из которых 40 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (18 часов занятия лекционного типа, 18 часов – занятия семинарского типа, 2 часа – групповые консультации, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 32 часа составляет самостоятельная работа студента.*

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

Обучающийся должен

**Знать:** основы линейной алгебры и математического анализа, а также теоретической механики;

**Уметь:** применять простейшие конструкции линейной алгебры и математического анализа для решения конкретных задач;

**Владеть:** простейшими навыками вычислений методами линейной алгебры и математического анализа.

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
Формализм вторичного квантования.	12	3	3				6	6		6
Формализм вторичного квантования на конечных базисных наборах векторов одночастичных состояний.	14	4	4				8	6		6

Эффективный гамильтониан. Уравнение Блоха.	<b>18</b>	4	4				<b>8</b>	10		<b>10</b>
Многоконфигурационные многочастичные методы, связанные с одномерными модельными подпространствами.	<b>26</b>	7	7	2			<b>16</b>	10		<b>10</b>
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>	<b>2</b>					2	<b>2</b>			
<b>Итого</b>	<b>72</b>	<b>18</b>	<b>18</b>	<b>2</b>		<b>2</b>	<b>40</b>	32		<b>32</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. Швебер С. Введение в релятивистскую квантовую теорию поля. – Издательство иностранной литературы, Москва, 1963.
2. Уилсон С. Электронные корреляции в молекулах. – Мир, Москва, 1987.
3. Зайцевский А.В. Методы теории многочастичных систем в квантовой химии. Методическое пособие – Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра физической химии, Москва, 1993.

#### Дополнительная литература

1. McWeeny R. Methods of Molecular Quantum Mechanics. – New York, Academic Press, 2001.
2. Helgaker T., Jorgensen P., Olsen J. Molecular Electronic-Structure Theory. – John Wiley and Sons Ltd, England, 2000.
3. McWeeny R., Sutcliffe B.T. Comp. Phys. Rep. 2, 217 (1984).
4. Nooijen M. The Coupled Cluster Green's Function. A perturbative diagrammatic view on many-electron theory. – Offsetdrukkerij Haveka B.V., Alblasterdam, 1992.
5. Paldus J. Coupled Cluster Theory in Methods in Computational Molecular Physics. – Ed.by S. Wilson and G.H.F. Diercksen, New York, 1992.

12. Язык преподавания – русский

13. Преподаватели:

с.н.с., к.х.н. Хрустов Владимир Федорович, кафедра физической химии химического факультета МГУ,  
email: khrustov76@gmail.com.

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

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

#### **Вопросы для зачета:**

1. Формализм вторичного квантования. Пространство чисел заполнения. Операторы рождения и уничтожения. Полевые операторы. Представление операторов физических величин. Формализм вторичного квантования на конечных базисных наборах векторов одночастичных состояний.

1.1. Приведение операторов к нормально-упорядоченной форме. Теорема Вика. Графическое представление операторов в нормально-упорядоченной форме. Диаграммы Голдстоуна и Гугенгольца-Брандова.

1.2. Оператор Гамильтона в нормально-упорядоченной форме в базисе канонических хартри-фоковских спин-орбиталей. Матричные элементы гамильтониана между детерминантами Слэтера и соответствующие им диаграммы.

1.3. Типы диаграмм: диаграммы открытые и закрытые, связанные и несвязанные, привязанные и непривязанные. Участие слагаемых, соответствующих этим диаграммам, в точных и приближённых выражениях энергии и волновых операторов электронных состояний молекул.

- 1.4. Формы отображения спиновых свойств электронных состояний. Бесспиновые операторы и операторы, действующие в пространстве спиновых функций. Система стандартных компонентов неприводимого тензорного оператора для группы вращений. Коммутационные соотношения Рака. Неприводимые спиновые тензорные операторы (НСТО). Схема их построения и использование НСТО для генерации собственных функций квадрата полного электронного спина.
- 1.5. Унитарное преобразование векторов одночастичных состояний. Метод Хартри-Фока в формализме вторичного квантования. Унитарное преобразование вектора состояния в методе МК ССП. Уравнения метода МК ССП.
2. Эффективный гамильтониан. Уравнение Блоха.
- 2.1. Общая постановка задачи. Обобщённое уравнение Блоха. Эффективные гамильтонианы Блоха и Клуазо.
- 2.2. Решение уравнения Блоха методами теории возмущений.
3. Многоконфигурационные многочастичные методы, связанные с одномерными модельными подпространствами. 3.1. Многочастичная теория возмущений для невырожденного уровня. Лемма о факторизации. Диаграммная структура точного выражения вектора состояния: теорема о связанных кластерах. Кластерное разложение для вектора состояния. Размерная согласованность точных вектора состояния и энергии системы.
- 3.2. Метод связанных кластеров (СК) на одномерном модельном подпространстве.
- 3.3. Основное уравнение метода СК. Варианты приближений в методе СК. Структура системы уравнений метода СК.
- 3.4. Сравнение метода СК с другими подходами. Сопоставление структур уравнений метода конфигурационного взаимодействия (КВ) и метода СК. Размерная несогласованность ограниченных вариантов метода КВ.
- 3.5. Способы «одевания» гамильтониана и соответствующие им версии нелинейного метода КВ для отдельного электронного состояния.
- 3.6. Группа методов ЕОМ-СС. Формулировки основных уравнений в этой группе методов. Метод spin-flip как форма учёта эффектов квазивыврождения в исходном состоянии системы.
- 3.7. Метод моментов как форма введения неитерационных поправок к энергиям возбуждённых состояний в формализме ЕОМ-СС. Назначение, аппарат и эффекты применения метода.
- 3.8. Многоконфигурационные многочастичные методы, связанные с многомерными модельными пространствами. Структурирование системы базисных спин-орбиталей. Полные и неполные модельные подпространства.
- 3.9. Версия MRSUCC метода СК для многомерных модельных подпространств. Структура волнового оператора Ежиорского и Монкхорста. Подход Палдуса и Ли к построению размерно-согласованного метода для модельных подпространств произвольной структуры. Метод RMRSUCC: ведение поправок в систему уравнений метода с использованием результатов метода MR CI.
- 3.10. Класс методов MRCC в фоковском пространстве. Валентно-универсальная форма волнового оператора по Линдгрёну для полных и квазиполных модельных пространств: нормально-упорядоченная форма волнового оператора с кластерными операторами, которым соответствуют связанные диаграммы.
- 3.11. Метод VU MR CC в подходе, предложенном Мюсиал и Бартлетом. Классификация молекулярных спинорбиталей и кластерных операторов метода. Разбиение модельного пространства и соответствующая структуризация кластерных операторов. Система уравнений метода VUMRCC для отдельных секторов модельного пространства. Иерархическая структура этой системы уравнений.

Условие внедрения подсистем. Размерная согласованность метода для полных и квазиполных модельных пространств. Проблемы его применения. Формы их решения в версии IHVUMR CC: структура системы уравнений метода IHVUMRCC.

### Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

<b>ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>				
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

<b>РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>	<b>ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ</b>
<b>Знать:</b> теоретические основы современных методов исследования структуры и свойств веществ	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете
<b>Уметь:</b> применить теоретические основы современных физико-химических методов при анализе и представлении материала научного сообщения на заданную тему	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете
<b>Владеть:</b> навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете