

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

И.о. декана химического факультета,
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«30» августа 2019 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)
Современные методы квантовой химии

Уровень высшего образования:
Магистратура

Направление подготовки (специальность):

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) ОПОП:

Физическая химия

Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №3 от 13.05.2019)

Москва 2019

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки 04.04.01 «Химия» (программа магистратуры) в редакции приказа МГУ от 30 августа 2019 г., №1033.

Год (годы) приема на обучение 2019/2020, 2020/2021

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – индикатор - ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция	Индикатор достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
СПК-3.М. Способен использовать физические и математические модели с учетом их возможностей и ограничений при планировании исследований, обработке и интерпретации данных в избранной области физической химии	СПК-3.М.1 Выбирает адекватные подходы и модели при обработке данных физико-химического эксперимента	Знать: возможности и ограничения расчетных методов квантовой химии при решении практических задач

3. Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетные единицы, всего 108 часов, из которых 47 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (19 часов занятия лекционного типа, 19 часов – занятия семинарского типа, 7 часов – индивидуальные консультации, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 61 час составляет самостоятельная работа студента.

4. 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.

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттеста-	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
Эволюция во времени состояния квантово-механической системы.	11	2	2		1		5	6		6
Вариационный принцип Френкеля. Уравнения теории отклика. Теорема Гельмана-Фейнмана (временная).	12	3	2		1		6	6		6
Основы теории отклика. Гамильтониан молекулярной системы во внешнем электромагнитном поле.	11	2	2		1		5	6		6
Версия теории отклика для волновой функции, полученной одноэкспонентным преобразованием стартовой волновой функции.	11	2	2		1		5	6		6
Свойства отклика для волновой функции, полученной двухэкспонентным преобразованием стартовой волновой функции. Схема метода.	11	2	2		1		5	6		6

Теория отклика и функции Грина. Поляризационный и электронный пропагаторы. Фурье-образы пропагаторов. Супероператорный формализм.	12	2	3		1		6	6		6
Аппроксимация полюсов и вычетов пропагаторов методами ТВ.	23	6	6		1		13	10		10
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>	17					2	2			15
Итого	108	19	19		7	2	47	46		61

6. 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.

7. 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.

8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Со всех компьютеров МГУ организован доступ к полным текстам научных журналов и книг на русском и иностранных языках. Доступ открыт по IP-адресам, логин и пароль не требуются: <http://nbmgu.ru/>**Основная литература**

Селезнёв А.О., Хрустов В.Ф., Химическая физика, 2012, 31, № 12, 3.

Дополнительная литература

1. Fetter A.L., Walecka J.D. Quantum Theory of Many-Particle Systems. McGraw-Hill, New York, 1971.
2. Lindgren I., Morrison J. Atomic Many-Body Theory, Springer-Verlag, New-York, 1982.

3. Lowdin P.-O., Mukherjee P.K. Chem Phys.Let. 14, 1 (1972).
4. Moccia R. Int. J. Quant. Chem. VII, 779 (1973).
5. Langhoff P.W., Epstein S.T., Karplus M. Rev. Mod. Phys. 44, 602 (1972).
6. Olsen J., Jorgensen P. J. Chem. Phys. 82, 3235 (1985).
7. Sasagane K., Alga F., Itoh R. J. Chem. Phys. 99, 3738 (1993).
8. Pawlovski F., Olsen J., Jorgensen P. J. Chem. Phys.142, 114109, (2015).
9. Linderberg J., Ohrn Y. Propagators in Quantum Chemistry, Second Ed., John Wiley & Sons Inc. Hoboken, New Jersey, (2004).
10. Cederbaum L.S., Domcke W., Adv. Chem. Phys. 26, 206, (1977).

Материально-техническое обеспечение: специальных требований нет, занятия проводятся в обычной аудитории, оснащенной доской и мелом (фломастерами)

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватель:

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.2.

Вопросы для зачета:

1. Эволюция во времени состояния квантово-механической системы. Картины Шрёдингера, Гайзенберга и представление взаимодействия.
2. Вариационный принцип Френкеля. Уравнения теории отклика. Теорема Гельмана-Фейнмана (временная).
3. Основы теории отклика. Гамильтониан молекулярной системы во внешнем электромагнитном поле. Выражение дипольного момента как функции времени. Рабочие формулы для дипольного момента, поляризуемости, гиперполяризуемостей.

4. Версия теории отклика для волновой функции, полученной одноэкспонентным преобразованием стартовой волновой функции. Уравнения теории отклика в данной её версии для k -того порядка теории возмущений (ТВ). Система уравнений отклика для первого и второго порядков ТВ.

4.1. Спектральные представления свойств отклика. Обобщённое уравнение приближения случайных фаз. Матрица отклика. Выражения дипольного момента и поляризуемости как производных квазиэнергии по амплитудам компонент потенциала внешнего электромагнитного поля.

4.2. Свойства отклика в рамках метода полного конфигурационного взаимодействия.

4.3. Приближение TDHF. Структура системы уравнений на собственные значения.

5. Свойства отклика для волновой функции, полученной двухэкспонентным преобразованием стартовой волновой функции. Схема метода. Основные уравнения в первом порядке ТВ. Свойства отклика в данном приближении.

6. Теория отклика и функции Грина. Функция Грина в приближении линейного отклика. Причинная, опережающая и запаздывающая функции Грина. Поляризационный и электронный пропагаторы. Фурье-образы пропагаторов. Супероператорный формализм.

6.1. Уравнение движения для функции Грина и его фурье-образ.

6.2. Приведение выражений поляризационного и электронного пропагатора к форме, удобной для их аппроксимации. Выбор базисов в пространствах векторов состояний. Операторы, введение которых в бинарное произведение операторов не изменяет его величину. Универсальное рабочее выражение для фурье-образов пропагаторов.

7. Аппроксимация полюсов и вычетов пропагаторов методами ТВ.

7.1. Аппроксимации, основанные на ТВ для невырожденного уровня (ТВНУ). Их достоинства и недостатки.

7.1.1. Полюса и вычеты поляризационного пропагатора в нулевом порядке ТВНУ, в рамках первого порядка ТВНУ (приближение случайных фаз, RPA) и в пределах второго порядка ТВНУ (приближение SOPPA).

7.1.2. Полюса и вычеты электронного пропагатора в нулевом порядке ТВНУ и в рамках первого порядка ТВНУ.

7.1.3. Основные черты метода ADC (для поляризационного пропагатора).

7.2. Аппроксимация полюсов и вычетов поляризационного пропагатора на базе ТВ для многомерного модельного подпространства (ТВММП). Структура модельного подпространства. Выбор базиса в пространстве векторов состояний. Рабочее выражение фурье-образа поляризационного пропагатора.

7.2.1. Аппроксимация выражений поляризационного пропагатора и соответствующей проблемы собственных значений в нулевом порядке и в рамках первого порядка ТВММП (метод FOMRPPA). Критерии сбалансированной аппроксимации характеристик электронных переходов в молекулах, способы настройки расчётной схемы метода FOMRPPA для достижения этой цели. Различие возможностей аппарата ТВ для сбалансированной аппроксимации двух характеристик переходов: их энергий и вероятностей. Сопоставление многоконфигурационного приближения случайных фаз (MCRPA) и метода FOMRPPA.

7.2.2. Аппроксимация выражений поляризационного пропагатора и соответствующей проблемы собственных значений в рамках второго порядка ТВММП. Сопоставление этой аппроксимации с методом SOPPA.

7.3. Аппроксимация полюсов и вычетов электронного пропагатора на базе ТВММП. Структуры модельных подпространств в пространствах, и выбор базисных наборов в них. Рабочее выражение фурье-образа электронного пропагатора.

7.3.1. Аппроксимация выражений электронного пропагатора и соответствующей проблемы собственных значений в нулевом порядке и в рамках первого порядка ТВММП (метод FOMREPA). Различие точностей аппроксимации для двух подсистем полюсов: потенциалов ионизации и сродства к электрону – в методе FOMREPA.

7.3.2. Подход к аппроксимации полюсов электронного пропагатора в методе MCSTEP.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

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

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
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

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
Знать: теоретические основы современных методов исследования структуры и свойств веществ	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете