Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова Химический факультет

Декан химического факультета, Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«30» августа 2021 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ) МФК**

**Строение и динамика молекул**

**Molecular Structure and Dynamics**

**Уровень высшего образования:**

Бакалавриат, специалитет, магистратура

**Направление подготовки:**

Для всех направлений подготовки

**Форма обучения:**

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена   
Учебно-методической комиссией факультета

(протокол №7 от 07.07.2021)

Москва 2021

1. **Место дисциплины (модуля) в структуре ООП:** вариативная часть ООП, Межфакультетские курсы.
2. **Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников).** Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП указано в Общей характеристике ОПОП.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Уровень** | **Компетенция** | **Индикаторы достижения** | **Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)** |
| **Б** | **УК-2 (ОС МГУ), УК-6 (ФГОС ВО)** Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни | Критически анализирует собственный интеллектуальный потенциал, оценивает возможные направления саморазвития | **Знать:** математические и физические модели, используемые при решении задач в области строения и динамики молекул  **Знать:** условия и границы применимости стационарных и динамических физико-математических моделей молекулярного строения  **Уметь:** определять потребность в получении дополнительных знаний для расширения своего кругозора на основе критической самооценки  **Уметь:** осваивать новые знания за пределами сферы своих профессиональных интересов  **Уметь:** интерпретировать результаты физико-математического моделирования строения и свойств молекулярных систем  **Владеть:** навыками физико-математического моделирования свойств молекулярных систем и процессов с их участием |
| **С** | **УК-11.** Способен определять и реализовывать приоритеты личностного и  профессионального развития на основе самооценки |
| **М** | **УК-8.** Способен определять и реализовывать приоритеты личностного и  профессионального развития на основе самооценки |

Б – бакалавриат (ФГОС ВО, интегрированная подготовка ОС МГУ), С – специалитет (ОС МГУ), М – магистратура (ОС МГУ)

**3. Объем дисциплины (модуля)** составляет 1 зачетную единицу, всего 36 часов, из которых 24 часа составляет контактная работа учаще гося с преподавателем (22 часа занятия лекционного типа, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 12 часов составляет самостоятельная работа учащегося.

**4. Для того чтобы формирование данной компетенции было возможно, обучающийся должен:**

знать: основы математического анализа, линейной алгебры, теории вероятностей, базовые подходы к решению уравнений математической физики, основы теоретической, квантовой и статистической механики;

уметь применять базовые методы решения дифференциальных уравнений и систем линейных уравнений, составлять основные уравнения движения теоретической механики и применять базовые постулаты квантовой механики.

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

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Наименование и краткое содер- жание разделов и тем дисцип- лины (модуля),**  **форма промежуточной аттеста- ции по дисциплине (модулю)** | **Всего (часы**) | В том числе | | | | | | | | |
| **Контактная работа (работа во взаимодействии с препо- давателем), часы**  из них | | | | | | **Самостоятельная рабо- та обучающегося, часы** из них | | |
| Занятия лекционного типа | Занятия семинарского типа | Групповые консультации | Индивидуальные кон- сультации | Учебные за- нятия, на- правленные на проведе- ние текуще- го контроля успеваемо- сти, проме- жуточной аттестации | **Всего** | Выполнение домашних заданий | Подготовка рефератов и т.п.. | **Всего** |
| Тема 1 Квантовая динамическая задача | 3 | 2 |  |  |  |  | 2 | 1 |  | 1 |
| Тема 2 Адиабатические и неадиабатические процессы | 3 | 2 |  |  |  |  | 2 | 1 |  | 1 |
| Тема 3 Неэмпирическая молекулярная динамика | 3 | 2 |  |  |  |  | 2 | 1 |  | 1 |
| Тема 4 Молекулярная динамика Кара-Паринелло | 3 | 2 |  |  |  |  | 2 | 1 |  | 1 |
| Тема 5 Квазиклассическая динамика | 3 | 2 |  |  |  |  | 2 | 1 |  | 1 |
| Тема 6 Неадиабатическая динамика | 3 | 2 |  |  |  |  | 2 | 1 |  | 1 |
| Тема 7 Стационарные состояния молекул | 3 | 2 |  |  |  |  | 2 | 1 |  | 1 |
| Тема 8 Колебания молекул | 3 | 2 |  |  |  |  | 2 | 1 |  | 1 |
| Тема 9 Классическая молекулярная динамика | 3 | 2 |  |  |  |  | 2 | 1 |  | 1 |
| Тема 10 Реакционные столкновения молекул | 3 | 2 |  |  |  |  | 2 | 1 |  | 1 |
| Тема 11 Оценка констант равновесия и констант скорости реакции | 2 | 1 |  |  |  |  | 1 | 1 |  | 1 |
| Тема 12 Сложные процессы и фотохимические реакции | 2 | 1 |  |  |  |  | 1 | 1 |  | 1 |
| Промежуточная аттестация *зачет* | 2 |  |  |  |  | 2 | 2 |  |  |  |
| **Итого** | **36** | **24** | **0** | **0** | **0** | **2** | **24** |  |  | **12** |

**Содержание тем:**

1. **Квантовая динамическая задача** о состояниях молекулярных систем. Оператор эволюции и его аппроксимации (расщепленный оператор). Варианты формулировок ядерной и электронной подзадач: стационарный и явно зависящий от времени.
2. **Адиабатические и неадиабатические процессы**: стационарный и динамический критерии адиабатичности процессов.
3. **Неэмпирическая молекулярная динамика** в адиабатическом приближении (Борна-Оппенгеймера). Теорема Гельмана–Фейнмана. Дополнительные компоненты сил. Алгоритмы Верле.
4. **Молекулярная динамика в приближении Кара-Паринелло**. Уравнения движения в форме Лагранжа. Частично согласованная эволюция ядерной и электронной подсистем. Силы Пулаи.
5. **Квазиклассическая динамика**. Основные идеи. Варианты формулировок.
6. **Неадиабатическая динамика** в двух вариантах: (1) перескоки между адиабатическими потенциалами (поверхностями) и (2) с использованием базиса диабатических состояний.
7. **Стационарные состояния ядерной подсистемы** молекулы в адиабатическом приближении. Условия разделения поступательного, колебательного и вращательного движений. Движения большой амплитуды и колебательный угловой момент.
8. **Колебания молекул**. Нормальные колебания. Ангармонизм и взаимодействие колебаний. Резонансы. Эффективные колебательные моды.
9. **Силовые поля и классическая молекулярная динамика**. Комбинированное квантово-классическое описание молекулярных систем: механическое и электронное включение квантовой подсистемы в классическое окружение.
10. **Реакционные столкновения молекул.** Сечения столкновения и константы скорости процесса: уровневая, микроскопическая и макроскопическая. Реакционные координаты и условность путей минимальной энергии.
11. **Приближение равновесия и базовые варианты оценки константы равновесия и константы скорости реакции** при использовании методов статистической механики в рамках подхода Гиббса. Уравнения теории активных столкновений (Траутца-Льюиса) и теории абсолютных скоростей реакций (Эйринга-Поляни) как частные случаи.
12. **Сложные процессы и фотохимические реакции**: общие подходы к описанию и оценке эффективных констант скорости.

6. Образовательные технологии:

* мультимедийное сопровождение лекций;
* использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса (сайт, электронная почта);
* преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ и зарубежной практики.

**7. 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

1. У. Флайгер, “Строение и динамика молекул”, Москва: Мир, 1982, том 1.
2. Ф. Банкер, П. Йенсен, “Симметрия молекул и спектроскопия”, Москва: Мир, 2004.
3. А. Мессиа, “Квантовая механика”, т. 1 и 2, Москва: Наука, 1979.
4. Ю.В. Новаковская, “Теория скорости химического превращения”, Москва: МГУ, 2003.
5. D. Marx, J. Hutter, “Ab initio molecular dynamics: theory and implementation”, <http://www.fz-juelich.de/nic-series/>

Дополнительная литература

1. А.С. Давыдов, “Квантовая механика”, Москва: Физматлит, 1963.
2. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, “Статистическая физика”, часть 1, Москва: Физматлит, 2005.
3. Г. Эйринг, С.Г. Лин, С.М. Лин, “Основы химической кинетики”, Москва: Мир, 1983.
4. С. Глесстон, К. Лейдлер, Г. Эйринг “Теория абсолютных скоростей реакций”, Москва: Иностранная литература, 1948.
5. Ю.В. Новаковская. “[Оценка константы скорости и константы равновесия простой реакции на основании квантовохимических расчетов](http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/novakovskaya/NovakovskayaYV.pdf)”.   
   <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/phys.html>

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости): использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса и мультимедийных технологий на лекциях.

* Описание материально-технической базы.
* Занятия проводятся в аудиториях, оснащенных персональным компьютером и мультимедийным проектором.

1. **Язык преподавания** – русский
2. **Преподаватели:**

Новаковская Юлия Вадимовна, доктор физико-математических наук, профессор

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета. На зачете

проверяется достижение результатов обучения, перечисленных в п.2.

**Примерный перечень вопросов к зачету**

1. Практическое применение оператора эволюции: основные идеи и приближения.

2. Сходство и различия стационарного и динамического критериев адиабатичности процессов.

3. Гамильтонова динамика молекулярных систем. Границы корректного использования сил Гельмана–Фейнмана.

4. Алгоритмы расчета перемещений частиц и их скоростей при динамическом моделировании.

5. Лагранжева динамика молекулярных систем: преимущества и ограничения в сравнении с гамильтоновой динамикой.

6. Базовые конструкции квазиклассической динамики. Возможности и недостатки в сравнении с классическим и квантовым вариантами.

7. Неадиабатическая динамика с перескоками между адиабатическими потенциалами: связь с классическим критерием Месси.

8. Диабатические состояния и преимущества их использования в качестве базиса при изучении динамики молекулярных систем.

9. Условия Эккарта и границы их применимости. Колебательно-вращательное взаимодействие и колебательный угловой момент.

10. Инверсия и внутреннее вращение как основные типы движений большой амплитуды. Равновесные и опорные конфигурации молекул.

11. Нормальные колебания молекул и эффективные колебательные моды.

12. Основные идеи построения силовых полей. Варианты комбинирования квантового и классического описания при моделировании больших молекулярных систем.

13. Сечение реакционного столкновения молекул. Варианты определения констант скорости процесса.

14. Основные приближения, лежащие в основе уравнений Траутца-Льюиса и Эйринга. Возможность учета туннельных эффектов.

15. Основные идеи, лежащие в основе анализа кинетики сложных процессов.

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  Результат | 2 | 3 | 4 | 5 |
| 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 (до-  пускает 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 |

**Критерии оценки ответов на зачете:**

*Зачтено (оценка 3, 4 и 5)*

Ответ логически выстроен и излагается на хорошем научном языке. Студент владеет необходимыми источниками и литературой, ориентируется в них, использует при ответе специализированную лексику, дает грамотные ответы на основной и дополнительные вопросы.

*Не зачтено (оценка 2)*

В ответе полностью отсутствует явная логика. Студент не владеет в полной мере даже основными источниками, не ориентируется в них, при ответе не использует специализированную лексику, дает неудовлетворительные ответы на дополнительные и основные вопросы.

|  |  |
| --- | --- |
| **РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ**  **по дисциплине (модулю)** | **ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ** |
| **Знать:** математические и физические модели, используемые при решении задач в области строения и динамики молекул  **Знать:** условия и границы применимости стационарных и динамических физико-математических моделей молекулярного строения | мероприятия текущего контроля успеваемости |
| **Уметь:** интерпретировать результаты физико-математического моделирования строения и свойств молекулярных систем  **Уметь:** определять потребность в получении дополнительных знаний для расширения своего кругозора на основе критической самооценки  **Уметь:** осваивать новые знания за пределами сферы своих профессиональных интересов | мероприятия текущего контроля успеваемости |
| **Владеть:** навыками физико-математического моделирования свойств молекулярных систем и процессов с их участием | мероприятия текущего контроля успеваемости |