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**

**Электронное строение:**

**вчера, сегодня и завтра квантовой химии**

**Electronic structure:**

**yesterday, today, tomorrow of quantum chemistry**

**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 электронного строения молекул  **Знать:** условия и границы применимости приближений, лежащих в основе физико-математических моделей электронного 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 электронных состояний молекулярных систем  **Владеть:** навыками физико-математического моделирования электронных состояний 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 26 часов составляет контактная работа учаще гося с преподавателем (24 часа занятия лекционного типа, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 10 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 Критерии адиабатичности состояний и процессов | 2 | 2 |  |  |  |  | 2 | 0.5 |  | 0.5 |
| Тема 2 Две базовые концепции – связевых функций и молекулярных орбиталей | 2 | 2 |  |  |  |  | 2 | 1 |  | 1 |
| Тема 3 Определители как базовая конструкция | 2 | 2 |  |  |  |  | 2 | 1 |  | 1 |
| Тема 4 Однодетерминантное приближение и метод самосогласованного поля | 2 | 2 |  |  |  |  | 2 | 1 |  | 1 |
| Тема 5 Энергия электронной корреляции | 2 | 2 |  |  |  |  | 2 | 0.5 |  | 0.5 |
| Тема 6 Теория возмущений: методология подхода | 2 | 2 |  |  |  |  | 2 | 1 |  | 1 |
| Тема 7 Вариационная аппроксимация электронных состояний: идеология многоконфигурационных методов | 2 | 2 |  |  |  |  | 2 | 1 |  | 1 |
| Тема 8 Проблема размерной согласованности и кластерное разложение электронной волновой функции | 2 | 2 |  |  |  |  | 2 | 1 |  | 1 |
| Тема 9 Электронная плотность молекулы и метод функционала плотности | 2 | 2 |  |  |  |  | 2 | 0.5 |  | 0.5 |
| Тема 10 Проблемы квантовохимических методов. | 2 | 2 |  |  |  |  | 2 | 0.5 |  | 0.5 |
| Тема 11 Особенности формирования базисных наборов функций при описании электронного строения | 2 | 2 |  |  |  |  | 2 | 1 |  | 1 |
| Тема 12 Идеология метода квантового Монте-Карло, применение машинного обучения и построение нейронных сетей | 2 | 2 |  |  |  |  | 2 | 1 |  | 1 |
| Промежуточная аттестация *зачет* | 2 |  |  |  |  | 2 | 2 |  |  | 10 |
| **Итого** | **36** | **24** | **0** | **0** | **0** | **2** | **26** |  |  | **10** |

**Содержание тем:**

1. Теоретический и экспериментальный **критерии адиабатичности** состояний и процессов. Электронная и ядерная молекулярные квантовые задачи.
2. Проблема существования уравнений на определение одноэлектронных состояний. Две **базовые концепции**: построение **связевых одноэлектронных функций** из атомных орбиталей **и** аппроксимация **молекулярных орбиталей** линейными комбинациями атомных. Идеология метода валентных связей и метода молекулярных орбиталей: сходство, различия, достоинства, недостатки.
3. **Определители**, построенные из одноэлектронных функций, как базис при описании электронных состояний молекул.
4. **Однодетерминантное приближение** в его базовой реализации: **метод самосогласованного поля** (ССП) Хартри-Фока-Рутана. Его достоинства и проблемы.
5. **Энергия электронной корреляции** как малая, но очень существенная величина. Факторы, обусловливающие ее наличие.
6. **Теория возмущений** как способ уточнения однодетерминантного описания. **Идеология метода** Меллера-Плессета. Особенности метода, его «плюсы», «минусы» и границы применимости.
7. **Вариационное и частично вариационное построение аппроксимаций электронных волновых функций** молекул в базисе определителей: идеология многоконфигурационных методов. Метод конфигурационного взаимодействия и многоконфигурационный метод самосогласованного поля.
8. **Проблема размерной согласованности** методов. Концепции электронных пар и кластеров. Кластерное разложение электронной волновой функции. **Метод связанных кластеров** и его варианты. Современный «золотой стандарт» квантовохимических оценок энергий: можно ли его улучшить?
9. **Электронная плотность молекулы** как реальная или неполноценная альтернатива полноэлектронной волновой функции. **Метод функционала плотности**: базовые идеи, ограничения и современные реализации.
10. Особенности распределения электронной плотности. Условие заострения электронной волновой функции в окрестности ядер и при бесконечно малых межэлектронных расстояниях. **Проблемы квантовохимических методов.**
11. **Особенности формирования базисных наборов** функций при решении электронной задачи. Суперпозиционные ошибки базисных наборов. Атомные орбитали, связевые функции, сжатие базисных наборов, применение неодноцентровых функций и идеология методов F12.
12. **Идеология метода** **квантового Монте-Карло** (МК) как альтернативы экспоненциальному росту числа определителей в многоконфигурационных подходах. Вариационный метод квантового МК. **Применение машинного обучения**.

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. L. Piela. "Ideas of quantum chemistry", New York: Elsevier, 2007.
  2. A. Szabo, N.S. Ostlund. "Modern quantum chemistry (Introduction to advanced electronic structure theory)" New York: Dover, 1996.
  3. И. Майер. "Избранные главы квантовой химии". Москва: Бином, 2006.
  4. F. Jensen. "Introduction to computational chemistry", Chichester: Wiley, 2001.
  5. W. Koch, M.C. Holthausen. A Chemist’s Guide to Density Functional Theory. Wiley, 2001.
  6. Ю.В. Новаковская. "Молекулярные системы. Теория строения и взаимодействия с излучением", часть II "Квантовые состояния молекул", Москва: УРСС, 2004.

Дополнительная литература

* 1. Г. Гельман. "Квантовая химия", Москва: Бином, 2012.
  2. Дж. Слэтер, "Электронная структура молекул", Москва: Мир, 1965.
  3. Р. Фларри. "Квантовая химия", Москва: Мир, 1985.
  4. С. Фудзинага. "Метод молекулярных орбиталей", Москва: Мир, 1983.
  5. Н.Ф. Степанов, В.И. Пупышев. "Квантовая механика молекул и квантовая химия", Москва: Изд. МГУ, 1991.
  6. В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. "Теория строения молекул", Ростов-на-Дону: Феникс, 1997.

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. Адиабатическое приближение: физический смысл, условия применимости и задачи, требующие выхода за его рамки
  2. Метод валентных связей и метод молекулярных орбиталей: сравнение концепций.
  3. Составляющие электронной энергии в однодетерминантном приближении в сравнении с моделями независимых электронов и электронных пар.
  4. Оператор Фока как одноэлектронный оператор. Насколько согласованы состояния электронов? Насколько хорошо оценены энергии их взаимодействия?
  5. Теория возмущений как метод учета энергии электронной корреляции. Базовые концепции и условия применимости.
  6. Вариационный и частично вариационный подходы к оценке энергии электронной корреляции. Выбор активного пространства орбиталей.
  7. Размерная согласованность при описании молекулярных систем.
  8. Идеология кластерного разложения электронной волновой функции. Преимущества и недостатки подхода.
  9. Ограничения и перспективы метода функционала плотности. Оператор Кона-Шэма: сходство и отличие от оператора Фока.
  10. Основное и возбужденные электронные состояния молекулярных систем. Как выбрать квантовохимический метод описания?
  11. Общие подходы к формированию базисных наборов функций при решении электронной задачи.
  12. Основные идеи метода квантового Монте-Карло. Возможность рационализации подхода.

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 электронного строения молекул  **Знать:** условия и границы применимости приближений, лежащих в основе физико-математических моделей электронного строения | мероприятия текущего контроля успеваемости |
| **Уметь:** интерпретировать результаты физико-математического моделирования электронных состояний 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 электронных состояний молекулярных систем и процессов с их участием | мероприятия текущего контроля успеваемости |