

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)
Численная реализация базовых алгоритмов для квантовой химии

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) **Численные методы квантовой химии.**
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)
СПК-4. С. Способность использовать физические и математические модели с учетом их возможностей и ограничений при обработке и интерпретации экспериментальных данных в избранной области физической химии	Знать: возможности и ограничения расчетных методов квантовой химии при решении практических задач Знать: современные алгоритмы, применяемые при численном квантовохимическом моделировании Уметь: реализовать полный цикл расчета малоатомной молекулярной системы при помощи базовых методов квантовой химии Владеть: навыками выбора наиболее эффективного варианта численной реализации в зависимости от поставленной задачи и доступных вычислительных ресурсов

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 3 зачетных единиц, всего 108 часов, из которых 64 часа составляет контактная работа студента с преподавателем (28 часов – занятия лекционного типа, 28 часов – занятия семинарского типа, 4 часа – групповые консультации, 4 часа – промежуточный контроль успеваемости), 44 часа составляет самостоятельная работа учащегося.

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

Обучающийся должен

Знать: знания об основных методах квантовой химии в рамках программы 3 курса общего потока Химического факультета; принципами объектно-ориентированного программирования; как устроены базисные наборы.

Уметь: писать и запускать простые программы на C++; проводить действия с квадратными матрицами; вычислять значения определенных интегралов.

Владеть: аппаратом линейной алгебры; приемами написания ООП программ; работе с библиотеками линейной алгебры.

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					Самостоятельная работа обучающегося, часы			
		из них					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
Тема 1. Обзор основных методов квантовой химии. Формализация задач в математическом виде и основные алгоритмы решения.	11	4	5				9	2		2
Тема 2. Основные форматы представления молекулярных данных. Библиотека OpenBabel.	11	5	4				9	2		2
Тема 3. Гауссовы базисные наборы. Основные понятия. Формат представления данных в	12	4	6				10	2		2

различных программах.										
Тема 4. Обзор методов расчета одно- и двухэлектронных интегралов. Алгоритм схем МакМарчи-Давидсона, полиномов Риса, RI подходы. Существующие библиотеки расчета атомных интегралов.	11	5	4				9	2		2
Тема 5. Численные методы линейной алгебры. Диагонализация матриц. Вековая задача в неортогональном базисе. Библиотека LAPACK.	13	6	5				11	2		2
Тема 6. Процедура ССП. Генерация стартовых орбиталей в приближении голых ядер. Метод прямой итерации, квадратичный метод, метод DIIS.	14	4	4	4			12	2		2
Промежуточная аттестация: <u>экзамен</u>	36					4	4		32	32
Итого	108	28	28	4		4	64	12	32	44

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

Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир. 2001.

Дополнительная литература

1. A. Szabo, N.S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory, Dover Publication Inc, 1996.
2. T. Helgaker, P. Jorgensen, J. Olsen. Molecular Electronic-Structure Energy. John Wiley and Sons Ltd, 2000.
3. R. McWeeny, B.T. Pickup. Quantum theory of molecular electronic structure. Rep. Prog. Phys. v. 43, 1980
4. <http://www.chem.helsinki.fi/~manninen/aqc2012/Session180412.pdf> презентация по схеме Обары-Саики
5. http://folk.uio.no/helgaker/talks/SostrupIntegrals_10.pdf презентация по схеме МакМарчи-Давидсона
6. <https://bse.pnl.gov/bse/portal>, онлайн библиотека распространенных базисных наборов

12. Язык преподавания – русский

13. Преподаватель:

доц., к.ф.-м.н., Безруков Дмитрий Сергеевич, кафедра физической химии химического факультета МГУ;
e-mail: dsbezrukov@gmail.com

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

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

Вопросы для экзамена

1. Основные форматы представления данных о геометрии молекулы.
2. Гауссовы базисные наборы: валентное расщепление, диффузные; остовные и поляризационные оболочки; схема контрактации; примитивы и их нормировка; декартовы и сферические гармоники; контаминация.
3. Схемы расчета одно- и двухэлектронных интегралов, их преимущества и недостатки.
4. Методы диагонализации. Алгоритмы полной и частичной диагонализации. Метод Давидсона. Случай неортогональных базисов.
5. Математическая и алгоритмическая формулировка решения задачи метода ССП.

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 не принципиального 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: возможности и ограничения расчетных методов квантовой химии при решении практических задач	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене

Знать: современные алгоритмы, применяемые при численном квантовохимическом моделировании	
Уметь: реализовать полный цикл расчета малоатомной молекулярной системы при помощи базовых методов квантовой химии	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене
Владеть: навыками выбора наиболее эффективного варианта численной реализации в зависимости от поставленной задачи и доступных вычислительных ресурсов	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене