

**Программа утверждена на заседании  
Ученого Совета химического факультета  
Протокол № 4 от 3 июня 2015 г**

Декан химического факультета,  
Акад. РАН, профессор



/В.В. Лунин/

### **Рабочая программа дисциплины (модуля)**

1. Наименование дисциплины (модуля):

**Современные вычислительные методы в молекулярной спектроскопии**

**Цель** изучения дисциплины – обучение квалифицированному владению современными методами моделирования молекулярных спектров для получения основных молекулярных дескрипторов и прогнозирования физико-химических свойств веществ.

**Задачи** обучения направлены на приобретение учащимися следующих знаний и навыков: (1) знаний о современных методах исследования молекулярных спектров; (2) умению применять устойчивые численные методы для обработки экспериментальных данных; (3) умению выбирать метод моделирования, адекватный поставленной задаче, заданным условиям и имеющимся вычислительным средствам, и интерпретировать результаты расчетов

2. Уровень высшего образования – подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре

3. Направление подготовки: **04.06.01** Химические науки, Физико-математические науки, **направленности** Физическая химия

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок 1 «Дисциплины (модули)».

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
<b>ОПК-1</b> способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	<b>ОПК-1.1</b> систематизирует знания в выбранной области химии или смежных областях науки;	<b>Знает:</b> основные методы и критерии достоверности данных структурных исследований, их роль в физической химии <b>Умеет:</b> выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования
<b>СПК-2</b> Способен проводить расчетно-теоретические исследования физико-химической направленности с использованием современного программного обеспечения	<b>СПК-2.1</b> предлагает расчетно-теоретические методы исследования физико-химических характеристик систем разной природы <b>СПК-2.2</b> применяет современные методы компьютерного моделирования для решения задач физико-химической направленности	<b>Знает:</b> основы численных методов для обработки молекулярных спектров и для совместного использования результатов экспериментальных и теоретических исследований <b>Умеет</b> использовать современное программное обеспечение, предназначенное для расчета основных молекулярных дескрипторов <b>Умеет</b> использовать экспериментальные и теоретические данные молекулярной спектроскопии для нахождения связи между разными аспектами химической, электронной и пространственной структуры соединений и решения задач, возникающих в физико-химических исследованиях. <b>Владеет</b> основными навыками решения задач молекулярной спектроскопии с использованием современных вычислительных методов и экспериментальных спектральных данных

6. Объем дисциплины (модуля) 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 единицы, всего 108 часов, из которых 44 часа составляет контактная работа студента с преподавателем (36 часов занятия лекционного типа, 8 часов мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации), 64 часа составляет самостоятельная работа учащегося.*

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

В специалитете или бакалавриате и магистратуре должны быть освоены общие курсы : «Математический анализ» , «Линейная алгебра», «Физика», «Физическая химия», «Строение молекул», «Квантовая химия».

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 к коллоквиумам	Всего
Тема 1. Прямая и обратная спектроскопическая задача. Молекулярные спектры двухатомных молекул: основные методы обработки экспериментальных данных.	12	6					6	6		6
Тема 2. Математические модели восстановления функции потенциальной энергии, их использование для моделирования спектров.	9	3				2	5	3		6
Тема 3. Взаимодействующие электронные состояния: основные принципы анализа и моделирования молекулярных спектров.	11	3					3	8		8

Тема 4. Колебательный спектр многоатомной молекулы. Математические модели колебательного движения. Неэмпирические, полупэмпирические и эмпирические методы	<b>26</b>	12					<b>12</b>	12		<b>12</b>
Тема 5. Прямые и обратные задачи в обработке эксперимента. Некорректность задачи отыскания нормального решения систем линейных алгебраических уравнений. Понятие регуляризирующего алгоритма. Нелинейные некорректные задачи.	<b>20</b>	6				2	<b>8</b>	<b>12</b>		<b>12</b>
Тема 6. Математическая постановка обратной колебательной задачи. Использование результатов квантово-химических расчетов при нахождении молекулярного силового поля. Практические примеры расчета силовых полей.	<b>20</b>	6				2	<b>8</b>	<b>12</b>		<b>12</b>
Промежуточная аттестация: <u>зачет</u>	<b>10</b>					2	2			8
<b>Итого</b>	<b>108</b>	36				8	<b>44</b>	56		<b>64</b>

#### 9. Образовательные технологии.

Проводятся лекции с использованием мультимедийной техники; лекции-демонстрации, посвященные практическим аспектам применения современных вычислительных методов молекулярной спектроскопии.

#### 10. Оценочные материалы для проверки результатов обучения по дисциплине (модулю)

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 \ 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 (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

Типовые задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения, методические материалы, определяющие процедуры оценивания приведены в разделе **Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения.**

<b>РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>	<b>ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ</b>
<b>Знает:</b> основные методы и критерии достоверности данных структурных исследований, их роль в физической химии	устный опрос на зачете
<b>Знает:</b> основы численных методов для обработки молекулярных спектров и для совместного использования результатов экспериментальных и теоретических исследований	ДЗ, устный опрос на зачете
<b>Умеет:</b> использовать современное программное обеспечение, предназначенное для расчета основных молекулярных дескрипторов	ДЗ, устный опрос на зачете
<b>Умеет</b> использовать экспериментальные и теоретические данные молекулярной спектроскопии для нахождения связи между разными аспектами химической, электронной и пространственной структуры соединений	ДЗ, устный опрос на зачете
<b>Владеет:</b> основными навыками решения задач молекулярной спектроскопии с использованием современных вычислительных методов и экспериментальных спектральных данных	ДЗ

11. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и задания для самостоятельной работы, презентации к лекционным занятиям.

12. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

### **Основная литература**

М.А.Ельяшевич. Атомная и молекулярная спектроскопия. Москва. Эдиториал УРСС, 2001.

P.F. Bernath. Spectra of atoms and molecules. Oxford, University Press, 2005.

H. Lefebvre-Brion and R. W. Field. The Spectra and Dynamics of Diatomic Molecules. ELSEVIER ACADEMIC PRESS, 2004.

Ю.А.Пентин, Г.М.Курамшина. Основы молекулярной спектроскопии. Москва. Бином, Лаборатория знаний. 2008.

И.В.Кочиков, Г.М.Курамшина, Ю.А.Пентин, А.Г.Ягола . Обратные задачи колебательной спектроскопии. Москва, Издательство КУРС, 2017.

### **Дополнительная литература**

П.А. Браун, А.А. Киселев. Введение в теорию молекулярных спектров. Л.: Изд-во.ЛГУ, 1983

Ф. Банкер. Симметрия молекул и молекулярная спектроскопия. Изд-во • Мир, 1981

W. Demtröder. Atoms, Molecules and Photons. An Introduction to Atomic-, Molecular and Quantum-Physics. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2010

F. Jensen Introduction to Computational Chemistry. John Wiley & Sons Ltd, 2001.

- Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости):

<http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMESS.html>

<http://gaussian.com/>

<http://cccbdb.nist.gov/> Computational Chemistry Comparison and Benchmark DataBase

<https://bse.pnl.gov/bse/portal>, портал гауссовых базисов для квантово-химических расчетов,

<https://www.molpro.net>, сайт программы для квантовохимических расчетов MOLPRO

- Описание материально-технической базы.

Занятия проводятся в аудитории, оснащенной мультимедийным экраном и персональными компьютерами с выходом через ssh к серверу, на котором установлены необходимые программы.

13. Язык преподавания – русский

14. Преподаватели:

В.н.с., д.х.н. Курамшина Г.М., kuramshi@phys.chem.msu.ru, тел.: +7(495)939-29-50

Проф., д.ф-м.н. Пазюк Е.А., pazyuk@phys.chem.msu.ru, тел.: +7(495)939-28-25

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

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

Образцы домашних заданий:

1. Выполнить аппроксимацию неэмпирической функции потенциальной энергии двухатомной молекулы заданным аналитическим потенциалом.
2. Моделирование колебательно-вращательного спектра двухатомной молекулы: решение радиального уравнения Шредингера с использованием различных потенциалов, расчет матричных элементов дипольных моментов переходов.
3. Провести численное моделирование электронных спектров двухатомных молекул в заданном диапазоне энергий. Оценить влияние неадиабатических внутримолекулярных взаимодействий на ровибронную структуру спектра.
4. Оптимизация геометрии конформеров 1,2-дихлорэтана, построение потенциальной функции заторможенного внутреннего вращения с использованием теории функционала плотности.
5. Интерпретация колебательных спектров 1,2-дихлорэтана на основе квантовохимических расчетов.
6. Решение обратной колебательной задачи для конформеров 1,2-дихлорэтана, выбор модели молекулярного силового поля.
7. Использование процедуры масштабирования для коррекции квантовохимических силовых полей в различных системах обобщенных координат.

Вопросы для промежуточной аттестации – **зачета**:

1. Представление об общей структуре электронно-колебательно-вращательных уровней энергии двухатомных молекул.
2. Использование данных расчетов из первых принципов и экспериментальных данных для построения эмпирических потенциалом межатомного взаимодействия.
3. Моделирование ронивибронных спектров двухатомных молекул путем численного решения уравнения Шредингера.
4. Математические модели колебательного движения. Параметры модели. Неэмпирические, полуэмпирические и эмпирические методы в колебательной спектроскопии многоатомных молекул .
5. Прямая и обратная задача колебательной спектроскопии. Модели силовых полей. Выбор обобщенных координат.
6. Пакет программ Гауссиан для персонального компьютера, основные возможности. Оптимизация геометрии и определение стабильной конфигурации многоатомной молекулы. Выбор уровня расчета. Понятие о модельной химии.
7. Использование результатов квантовохимических расчетов для интерпретации колебательного спектра многоатомной молекулы.

**Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения**

Зачет проходит по билетам, включающем 2 вопроса. Уровень знаний аспиранта по каждому вопросу на «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». В случае если на все вопросы был дан ответ, оцененный не ниже чем «удовлетворительно», аспирант получает общую оценку «зачтено».