

**Программа утверждена на заседании
Ученого Совета химического факультета
Протокол № 4 от 03 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 результатов расчетов

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

3. Направление подготовки: **04.06.01** Химические науки, Физико-математические науки, **направленности** 02.00.04 Физическая химия, 02.00.17. Математическая и квантовая 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)

Формируемые компетенции (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
УК – 2 способность проектировать и осуществлять комплексные исследо-	31 (УК-2) Знать методы научно-исследовательской

<p>вания, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии наук</p>	<p>деятельности</p>
<p>ОПК -1 способность самостоятельно осуществлять научно- исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий</p>	<p>У1 (ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно- теоретические методы исследования</p>
<p>ПК -4 способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.04 Физическая химия</p>	<p>32 (ПК-4) Знать место и роль структурных исследований в физической химии 317 (ПК-4) Знать: основы численных методов для обработки молекулярных спектров и для совместного использования результатов экспериментальных и теоретических исследований У2 (ПК-4) Уметь использовать современное программное обеспечение, предназначенное для расчета структурных и энергетических параметров веществ У17(ПК-4) Уметь использовать современные вычислительные методы моделирования молекулярных спектров для получения основных молекулярных дескрипторов В10 (ПК-4) Владеть основными навыками решения задач молекулярной спектроскопии с использованием современных вычислительных методов и экспериментальных спектральных данных</p>
<p>ПК-15 способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.17 Математическая и квантовая химия</p>	<p>33 (ПК-15) Знать: основы численных методов для обработки молекулярных спектров и для совместного использования результатов экспериментальных и теоретических исследований У2 (ПК-15) Уметь: использовать экспериментальные и теоретические данные молекулярной спектроскопии для нахождения связи между разными аспектами химической, электронной и пространст-</p>

венной структуры соединений
 В2 (ПК-15) Владеть: методологией решения задач, возникающих при физико-химических исследованиях в области молекулярной спектроскопии.

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».

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.	11	3				2	5	6		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	24	12					12	12		12
Тема 5. Прямые и обратные задачи в обработке эксперимента. Некорректность задачи отыскания нормального решения систем линейных алгебраических уравнений. Понятие регуляризирующего алгоритма. Нелинейные некорректные задачи.	20	6				2	8	12		12
Тема 6. Математическая постановка обратной колебательной задачи. Использование результатов квантово-химических расчетов при нахождении молекулярного силового поля. Практические примеры расчета силовых полей.	20	6				2	8	12		12
Промежуточная аттестация: <i>зачет</i>	10					2	2			8

Итого	108	36				8	44	56		64

8. Образовательные технологии.

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

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

Аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и задания для самостоятельной работы. По теме каждой лекции указывается материал в источниках из списков основной и дополнительной литературы, а также из интернет-ресурсов.

10. 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.

11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватели:

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

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

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

1. Планируемые результаты обучения для формирования компетенций п.5 и соответствующие им критерии оценивания приведены в Приложении 1.
2. Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета.

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. Классификация электронных состояний, мультиплетная структура, принципы построения молекулярных термов из состояний отдельных атомов
3. Связь вращения и электронного движения: случаи связи по Гунду. Свойства симметрии вращательных уровней.
4. Использование данных расчетов из первых принципов и экспериментальных данных для построения эмпирических потенциалом межатомного взаимодействия.
5. Моделирование ровибронных спектров двухатомных молекул путем численного решения уравнения Шредингера.
6. Возбужденные электронные состояния. Выход за рамки адиабатического приближения. Спин-орбитальное, спин-спиновое и спин -вращательное взаимодействия.
7. Моделирование ровибронных уровней энергии с учетом внутримолекулярных взаимодействий. Гомогенные и гетерогенные взаимодействия.
8. Математические модели колебательного движения. Параметры модели. Неэмпирические, полуэмпирические и эмпирические методы в колебательной спектроскопии многоатомных молекул .
9. Прямая и обратная задача колебательной спектроскопии. Модели силовых полей. Выбор обобщенных координат.
10. Обратная задача определения силового поля многоатомной молекулы во внутренних и декартовых координатах с учетом симметрии.
11. Идентификация структуры молекулы по колебательному спектру.
12. Совместный анализ экспериментальных и теоретических данных при обработке данных молекулярной спектроскопии (УФ спектр, спектр ИК поглощения, спектр КР)

13. Пакет программ Гауссиан для персонального компьютера, основные возможности. Оптимизация геометрии и определение стабильной конфигурации многоатомной молекулы. Выбор уровня расчета. Понятие о модельной химии.
14. 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»

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине **СОВРЕМЕННЫЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В МОЛЕКУЛЯРНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ**

на основе карт компетенций выпускников

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИИ (С-СПК-1) И КРИТЕРИИ ИХ ОЦЕНИВАНИЯ

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю) и ШКАЛА оценивания					ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ*
	1	2	3	4	5	
31 (УК-2) Знать методы научно-исследовательской деятельности	Отсутствие знаний.	Фрагментарные знания о современных вычислительных методах молекулярной спектроскопии	Несистематические знания о современных вычислительных методах молекулярной спектроскопии	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания о современных вычислительных методах молекулярной спектроскопии	Сформированные и систематические знания о современных вычислительных методах молекулярной спектроскопии	Устный опрос в ходе зачета
У1 (ОПК-1) Уметь выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования	Отсутствие умений.	Умение использовать только отдельные методы	Ограниченное умение выбирать и использовать современные вычислительные методы молекулярной спектроскопии	В целом достаточно полное, но содержащее отдельные пробелы умение выбирать и применять современные вычислительные методы молекулярной спектроскопии.	Сформированное умение применять при решении практических задач современные вычислительные методы молекулярной спектроскопии.	Текущий контроль
32 (ПК-4) Знать место и роль структурных ис-	Отсутствие знаний.	Фрагментарные знания о структурных исследованиях	Ограниченные представления о структурных ис-	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы	Сформированные и систематические знания о структур-	Устный опрос в ходе зачета

следований в физической химии		в физической химии	следованиях в физической химии	представления о структурных исследованиях в физической химии	ных исследованиях в физической химии	
317 (ПК-4) Знать: основы численных методов для обработки молекулярных спектров и для совместного использования результатов экспериментальных и теоретических исследований	Отсутствие знаний.	Фрагментарные знания о численных методах обработки молекулярных спектров и совместного использования результатов экспериментальных и теоретических исследований	Ограниченные представления о численных методах обработки молекулярных спектров и совместного использования результатов экспериментальных и теоретических исследований	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления о численных методах обработки молекулярных спектров и совместного использования результатов экспериментальных и теоретических исследований	Сформированные и систематические знания о численных методах обработки молекулярных спектров и совместного использования результатов экспериментальных и теоретических исследований	Устный опрос в ходе зачета
У2 (ПК-4) Уметь использовать современное программное обеспечение, предназначенное для расчета структурных и энергетических параметров веществ	Отсутствие умений	Умение использовать только отдельные блоки программ расчета структурных и энергетических параметров веществ	Ограниченное умение выбирать и использовать программное обеспечение, предназначенное для расчета структурных и энергетических параметров веществ	Умение выбирать и использовать программное обеспечение, предназначенное для расчета структурных и энергетических параметров веществ с небольшим количеством принципиальных ошибок	Умение выбирать и использовать программное обеспечение, предназначенное для расчета структурных и энергетических параметров веществ	Текущий контроль. Домашние задания
У17(ПК-4) Уметь использовать современные вычислительные методы моделирования молекулярных	Отсутствие умений	Умение использовать только отдельные элементы вычислительных методов моделирования молеку-	Ограниченное умение использовать современные вычислительные методы моделирования молекуляр-	Умение использовать современные вычислительные методы моделирования молекулярных спектров для	Умение использовать современные вычислительные методы моделирования молекулярных спектров для	Домашние задания

спектров для получения основных молекулярных дескрипторов		лярных спектров для получения основных молекулярных дескрипторов	ных спектров для получения основных молекулярных дескрипторов	получения основных молекулярных дескрипторов с небольшим количеством принципиальных ошибок	получения основных молекулярных дескрипторов	
В10 (ПК-4) Владеть основными навыками решения задач молекулярной спектроскопии с использованием современных вычислительных методов и экспериментальных спектральных данных	Отсутствие навыков	Демонстрирует навыки использования вычислительных методов, но не владеет методами решения задач молекулярной спектроскопии с использованием экспериментальных спектральных данных	Демонстрирует навыки решения задач молекулярной спектроскопии с использованием современных вычислительных методов и экспериментальных спектральных данных, но допускает систематические ошибки	Демонстрирует навыки использования современных вычислительных методов и экспериментальных спектральных данных для решения задач молекулярной спектроскопии, но допускает отдельные ошибки	Демонстрирует сформированные навыки использования современных вычислительных методов и экспериментальных спектральных данных для решения задач молекулярной спектроскопии	Домашние задания
33 (ПК-15) Знать: основы численных методов для обработки молекулярных спектров и для совместного использования результатов экспериментальных и теоретических исследований	Отсутствие знаний.	Фрагментарные знания о численных методах обработки молекулярных спектров и совместного использования результатов экспериментальных и теоретических исследований	Ограниченные представления о численных методах обработки молекулярных спектров и совместного использования результатов экспериментальных и теоретических исследований	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления о численных методах обработки молекулярных спектров и совместного использования результатов экспериментальных и теоретических исследований	Сформированные и систематические знания о численных методах обработки молекулярных спектров и совместного использования результатов экспериментальных и теоретических исследований	Устный опрос в ходе зачета
У2 (ПК-15) Уметь:	Отсутст-	Базовые навыки	Фрагментарные	Сформированные,	Сформированные	Текущий кон-

<p>использовать экспериментальные и теоретические данные молекулярной спектроскопии для нахождения связи между разными аспектами химической, электронной и пространственной структуры соединений</p>	<p>вие умений</p>	<p>использования экспериментальных и теоретических данных молекулярной спектроскопии для нахождения связи между разными аспектами химической, электронной и пространственной структуры соединений и решения задач, возникавших в физико-химических исследованиях</p>	<p>навыки использования экспериментальных и теоретических данных молекулярной спектроскопии для нахождения связи между разными аспектами химической, электронной и пространственной структуры соединений и решения задач, возникавших в физико-химических исследованиях</p>	<p>но содержащие отдельные пробелы навыки использования экспериментальных и теоретических данных молекулярной спектроскопии для нахождения связи между разными аспектами химической, электронной и пространственной структуры соединений и решения задач, возникавших в физико-химических исследованиях</p>	<p>навыки использования экспериментальных и теоретических данных молекулярной спектроскопии для нахождения связи между разными аспектами химической, электронной и пространственной структуры соединений и решения задач, возникавших в физико-химических исследованиях</p>	<p>троль. Домашние задания</p>
<p>В2 (ПК-15) Владеть: методологией решения задач, возникающих при физико-химических исследованиях в области молекулярной спектроскопии.</p>	<p>Отсутствие навыков</p>	<p>Фрагментарное применение методологии решения задач, возникающих при физико-химических исследованиях в области молекулярной спектроскопии.</p>	<p>В целом успешное, но не систематическое применение методологии решения задач, возникающих при физико-химических исследованиях в области молекулярной спектроскопии.</p>	<p>В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение методологии решения задач, возникающих при физико-химических исследованиях в области молекулярной спектроскопии.</p>	<p>Успешное и систематическое применение методологии решения задач, возникающих при физико-химических исследованиях в области молекулярной спектроскопии.</p>	<p>Текущий контроль. Домашние задания</p>