

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)**  
**Численные методы учета электронной корреляции**

**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 учета электронной корреляции**
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)
<b>СПК-4. С.</b> Способность использовать физические и математические модели с учетом их возможностей и ограничений при обработке и интерпретации экспериментальных данных в избранной области физической химии	<b>Знать:</b> возможности и ограничения расчетных методов квантовой химии при решении практических задач <b>Знать:</b> современные алгоритмы, применяемые при численном квантовохимическом моделировании <b>Уметь:</b> реализовать полный цикл расчета малоатомной молекулярной системы при помощи базовых методов квантовой химии <b>Владеть:</b> 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 2 зачетных единицы, всего 72 часа, из которых 40 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (18 часов занятия лекционного типа, 18 часов – занятия семинарского типа, 2 часа – групповые консультации, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 32 часа составляет самостоятельная работа студента.*

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 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 рефератов и т.п.	Всего
Тема 1. Метод теории возмущений Меллера-Плессе. Аналитические выражения для МП2 и МП3.	14	4	4				8	6		6
Тема 2. Диаграммное представление. Алгоритм расчета произвольных порядков.	14	4	4				8	6		6
Тема 3. Метод конфигурационного взаимодействия. Определения знака возбужденного	13	3	3				6	7		7

определителя. KB2, 1+2.										
Тема 4. Метод связанных кластеров. Реализация CCSD.	<b>13</b>	3	3				<b>6</b>	7		<b>7</b>
Тема 5. Проблема систем с открытыми оболочками.	<b>16</b>	4	4	2			<b>10</b>	6		<b>6</b>
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>	<b>2</b>					2	<b>2</b>			
<b>Итого</b>	<b>72</b>	<b>18</b>	<b>18</b>	<b>2</b>		<b>2</b>	<b>40</b>	32		<b>32</b>

#### 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](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 - зачета. На зачете проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.5.

#### **Вопросы для зачета:**

1. Метод МПn: общая идея метода, выражения для поправок 2 и 3 порядков, применение диаграммных техник для получения выражений произвольного порядка, сравнение различных диаграммных подходов.
2. Метод КВ. Правила Слейтера для недиагональных элементов. Способы упорядочения возбужденных детерминантов.
3. Метод связанных кластеров. CCSD. Способы учета возбуждений более высоких порядков.
4. Вычислить поправки 2, 3 и 4 порядков в методе МП.
5. Заполнить матрицу KB2 и найти ее корни.
6. Сравнить результаты расчетов методами MPn, KB1+2 и CCSD.

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

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	2	3	4	5
Результат				
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие	В целом успешное, но не	В целом успешное, но содержащее	Успешное и систематическое

	умений	систематическое умение	отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

<b>РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>	<b>ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ</b>
<b>Знать:</b> возможности и ограничения расчетных методов квантовой химии при решении практических задач <b>Знать:</b> современные алгоритмы, применяемые при численном квантовохимическом моделировании	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете
<b>Уметь:</b> реализовать полный цикл расчета малоатомной молекулярной системы при помощи базовых методов квантовой химии	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете
<b>Владеть:</b> навыками выбора наиболее эффективного варианта численной реализации в зависимости от поставленной задачи и доступных вычислительных ресурсов	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете