

Белорусский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе
Белорусского государственного
университета

_____ А.Л. Голстик

(подпись)

26.08.2017

_____ (дата утверждения)

Регистрационный № УД- 4212 /уч.

**ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ ГЛАВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ.
КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА АТОМНО-МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ**

**Учебная программа учреждения высшего образования
по учебной дисциплине для специальности:**

1-31 81 02 Фотоника

Минск 2017 г.

Учебная программа составлена на основе Образовательного стандарта ОСВО 1-31 81 02-2012; учебного плана № G31-240/уч

СОСТАВИТЕЛЬ:

А.А. Луговский — доцент кафедры лазерной физики и спектроскопии Белорусского государственного университета, кандидат химических наук;

М.Б. Шундалов — доцент кафедры физической оптики Белорусского государственного университета, кандидат физико-математических наук;

Г.А. Пицевич — доцент кафедры физической оптики Белорусского государственного университета, кандидат физико-математических наук;

Рецензенты:

М.П. Самцов — зав. лаб. спектроскопии НИИ прикладных физических проблем им. А.Н. Севченко, доктор физико-математических наук, доцент.

Л.С. Ляшенко — доцент кафедры лазерной физики и спектроскопии Белорусского государственного университета, кандидат физико-математических наук, доцент.

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой лазерной физики и спектроскопии физического факультета Белорусского государственного университета (протокол № 12 от 26 мая 2017 г.);

Советом физического факультета (протокол № 12 от 26 июня 2017 г.).

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Квантово-механическое описание различных систем всегда позволяло более точно выбирать подходы к оптимальному выбору необходимой структуры или подбору эффективных методов синтеза этих систем. Активное развитие возможностей и параметров вычислительной техники в последние годы позволила расширить возможности и точность при вычислениях квантово-механическими методами. С появлением квантово-механических методов расчета молекулярных систем важные качественные изменения произошли в оптике: возобновился интерес к классическим ее разделам, появилась возможность расчета электронной структуры и свойств молекулярных систем, расчетов ИК спектров и термодинамических характеристик молекул, расчетов электронных спектров поглощения и свойств возбужденных состояний.

Цель курса — дать студентам теоретические основы квантово-механических методов расчета молекулярных систем, ознакомить их с широко доступными программными продуктами Chem.3D и HyperChem, MORAC, GAMESS позволяющими проводить оптимизацию геометрии молекул методами *ab initio*, молекулярной механики и полуэмпирическими квантово-химическими методами.

Предлагаемая программа решает задачи ознакомления студентов с важнейшими теоретическими вопросами квантовой механики, а также с конкретными методами расчета молекулярных систем и их практического применения. Приобретенные знания важны для более глубокого и качественного понимания других дисциплин. На примерах молекулярных систем студенты могут увидеть конкретное приложение квантово-механических представлений.

Таким образом, целью курса является освоение основных закономерностей образования колебательных спектров молекул и использование их при прогнозировании новых квантовых генераторов на колебательных переходах.

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Академические компетенции:

- Уметь применять базовые научно-теоретические знания для решения теоретических и практических задач.
- Владеть системным и сравнительным анализом.
- Владеть исследовательскими навыками.
- Уметь работать самостоятельно.
- Быть способным порождать новые идеи (обладать креативностью).
- Владеть междисциплинарным подходом при решении проблем.
- Иметь навыки, связанные с использованием технических устройств, управлением информацией и работой с компьютером.

- Владеть навыками устной и письменной коммуникации.
- Уметь учиться, повышать свою квалификацию в течение всей жизни.

Социально-личностные компетенции:

- Владеть качествами гражданственности.
- Быть способным к социальному взаимодействию.
- Владеть способностью к межличностным коммуникациям.
- Владеть навыками здорового образа жизни.
- Быть способным к критике и самокритике (критическое мышление).
- Уметь работать в команде.

Профессиональные компетенции:

- Применять знания теоретических и экспериментальных основ физики и математики, современных технологий и материалов, наноматериалов и нанотехнологий, методы исследования физических объектов, методы измерения физических величин, методы автоматизации эксперимента, методов планирования, организации и ведения научно-производственной, научно-педагогической, производственно-технической, опытно-конструкторской работы.

- Использовать новейшие открытия в естествознании, методы научного анализа, информационные образовательные технологии, физические основы современных технологических процессов, научное оборудование и аппаратуру.

- Проводить планирование и реализацию физического эксперимента используя квантово-механические методы.

- Пользоваться глобальными информационными ресурсами, компьютерными методами сбора, хранения и обработки информации, системами автоматизированного программирования, научно-технической и патентной литературой.

- Применять полученные знания фундаментальных положений физики, экспериментальных, теоретических и компьютерных методов исследования, планирования, организации и ведения научно-исследовательской, научно-производственной и научно-педагогической работы.

- Использовать новейшие открытия в естествознании, методы научного анализа, информационно-образовательные технологии, физические основы современных технологических процессов.

- Оценивать конкурентоспособность и экономическую эффективность разрабатываемого программного обеспечения.

- Разрабатывать новые технологии и осуществлять оценку проектных и технологических решений с учетом принципов рационального природопользования и конъюнктуры рынка.

– Осуществлять на основе методов математического моделирования оценку эксплуатационных параметров оборудования и технологических процессов, эффективности разрабатываемых технологий.

– Реализовывать методы защиты производственного персонала и населения в условиях возникновения аварий, катастроф, стихийных бедствий и обеспечения безопасности при осуществлении научной, производственной и педагогической деятельности.

– Владеть знаниями о структурной организации материи, о современных физических методах познания природы.

– Использовать концептуальные положения педагогики и методики преподавания физики и информатики, методики воспитательной работы, технические средства обучения.

– Применять психолого-педагогические знания, эффективные формы и методы обучения, новые технологии обучения.

– Осуществлять поиск, систематизацию и анализ информации по перспективным направлениям развития отрасли, инновационным технологиям, проектам и решениям.

– Определять цели инноваций и способы их достижения.

– Применять знания физических основ современных технологий, средств автоматизации, методов планирования и организации производства, методы анализа и организации внедрения инноваций в научно-производственной, научно-педагогической и научно-технической деятельности, правового обеспечения хозяйственной деятельности и налоговой системы, современного предпринимательства, государственного регулирования экономики и экономической политики.

– Пользоваться государственными языками Республики Беларусь и иными иностранными языками как средством делового общения.

Общий курс "Дополнительные главы квантовой механики. Квантовая механика атомно-молекулярных систем" разработан для студентов второй степени обучения физических специальностей университетов.

Программа курса составлена в соответствии с требованиями образовательного стандарта. Форма получения высшего образования — очная, дневная.

Общее количество часов — 154; аудиторное количество часов — 52, из них: лекции — 36, практические занятия — 12, контролируемая самостоятельная работа студентов — 4, самостоятельная работа 102 часов. Форма отчётности — экзамен.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

1. Введение. Основные понятия и приближения квантовой химии. Краткий обзор основных принципов и этапов развития квантовой механики. Основные приближения теории: нерелятивистское приближение, адиабатическое приближение, орбитальное приближение. Неэмпирические методы. Вывод уравнений Хартри-Фока-Рутана. Виды базисных функций.

2. Методы учета электронной корреляции. Многодетерминантные волновые функции. Методы ограниченного и полного КВ. Расчет корреляционных эффектов в рамках теории возмущений.

3. Полуэмпирические методы. Теория функционала плотности. Метод МО ЛКАО и метод Хюккеля. Полуэмпирические методы полного и частичного пренебрежения дифференциальным перекрыванием: CNDO, INDO, MNDO, AM1, PM3, ZINDO, ZINDO/S. Основные теоремы теории функционала плотности (ТФП).

4. Методы расчёта возбуждённых электронных состояний молекулярных систем. Временное приближение ТФП. Основные теоремы временного приближения ТФП. Ограниченность методов временного приближения ТФП. LRC- и CAM-поправки.

5. Многоопорные методы. Многоопорные приближения конфигурационного взаимодействия и теории возмущений.

6. Расчёт функций потенциальной энергии основного и возбуждённых состояний двухатомных молекул и моделирование ровибронных спектров. Поточечное построение функций потенциальной энергии (ФПЭ) основного и возбуждённых состояний двухатомных молекул на основе неэмпирического многоопорного метода теории возмущений. Расчёт энергий колебательных и вращательных состояний. Вычисление матричных элементов дипольного момента и факторов Франка – Кондона. Моделирование ровибронных спектров двухатомных молекул.

7. Квантово-механические подходы к анализу колебаний молекул и комплексов с большой амплитудой. Типы колебаний с большой амплитудой. Неприемлемость использования гармонического приближения и анализ проблем, возникающих при использовании ангармонического приближения, при анализе колебаний молекул и комплексов с большой амплитудой. Ограниченность понятий матриц кинематических коэффициентов и силовых постоянных.

8. Способы построения точного колебательного Гамильтониана в уравнениях Шредингера в случае ограниченного числа колебательных степеней свободы. Построение колебательного Гамильтониана в случае использования декартовых координат в качестве колебательных. Построение векторов Вильсона для естественных колебательных координат. Использование векторов Вильсона для нахождения точного вида оператора кинетической энергии в импульсном представлении. Нахождение дивергенций от векторов Вильсона для основных типов естественных координат.

9. Методы построения многомерных поверхностей потенциальной энергии с помощью квантово-химических пакетов в случае использования различных наборов обобщенных колебательных координат. Особенности построения поверхности потенциальной энергии (ППЭ) в случае использования торсионных колебательных координат. Особенности построения ППЭ при использовании неперiodических (валентных и деформационных) естественных колебательных координат. Способы интерполяции функции потенциальной энергии в случае ее задания в узлах равномерной N-мерной сетки. Учет биений Гибса при интерполяции функции потенциальной энергии рядами Фурье

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА ДИСЦИПЛИНЫ

Номер раздела, темы, занятия	Название раздела, темы, занятия; перечень изучаемых вопросов	Количество аудиторных часов					Количество часов УСР	Литература	Формы контроля знаний
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное			
1	2	3	4		5	6	7	8	9
1	<i>Введение Основные понятия и приближения квантовой химии.</i>	4						10,1д	
2	<i>Методы учета электронной корреляции.</i>	4						10-30	
3	<i>Полуэмпирические методы. Теория функционала плотности.</i>	4						10-30	
4	<i>Методы расчёта возбуждённых электронных состояний молекулярных систем. Временное приближение ТФП.</i>	4	2			0	0	10-30	
5	<i>Многоопорные методы.</i>	4	2				1	10-30	Рефераты
6	<i>Расчёт функций потенциальной энергии основного и возбуждённых состояний двухатомных молекул и моделирование ровибронных спектров.</i>	6	2					10-30	
7	<i>Квантово-механические подходы к анализу колебаний молекул и комплексов с большой</i>	4	2				1	70,80	Рефераты

	<i>амплитудой.</i>								
8	<i>Способы построения точного колебательного Гамильтониана в уравнениях Шредингера в случае ограниченного числа колебательных степеней свободы</i>	4	2				1	46,56	Рефераты
9	<i>Методы построения многомерных поверхностей потенциальной энергии с помощью квантово-химических пакетов в случае использования различных наборов обобщенных колебательных координат.</i>	4	2				1	46,56	Рефераты
	ВСЕГО	36	12				4		Экзамен

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

а) Основная

1. Заградник Р., Полак Р. Основы квантовой химии. М.: Мир, 1979.
2. Фудзинага С. Метод молекулярных орбиталей. М.: Мир, 1983.
3. Мак-Вини Р., Сатклиф Б., Квантовая механика молекул. М.: Мир, 1972.
4. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Ростов на Дону: Феникс, 1997.
5. Цюлике П. Квантовая химия. М.: Мир, 1976.
6. Счастнев П.В. Теория электронных оболочек молекул. Новосибирск: Изд-во НГУ, 1973.
7. М.В.Волькенштейн, Л.А.Грибов, М.А.Ельяшевич, Б.И.Степанов. Колебания молекул. 1976
8. Ф.Банкер, П.Йенсен Симметрия молекул и спектроскопия 2004

б) Дополнительная

1. Cramer C.J., Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models. Chichester: John Wiley & Sons, 2002.
2. Т. Кларк. Компьютерная химия. – М.: Мир, 1990.-382 с.
3. Сигал Дж. Полуэмпирические методы расчета электронной структуры. М.: Мир, 1980, Т. 1.-327 с., Т. 2. – 371 с.
4. G.A. Pitsevich Hybrid Method of Studying LAM in Clusters. The Case of Hydrogen Bond. Lambert Academic Publishing, Saarbrücken, Germany, 2016
5. P. Jensen, P.R. Bunker, Computational Molecular Spectroscopy, John Wiley & Sons, 2000

Перечень используемых средств диагностики результатов учебной деятельности

Рекомендуемые формы контроля знаний

1. Реферативные работы
(Уср проводится в форме выступлений по защите рефератов)

Рекомендуемые темы реферативных работ:

1. Приложение квантово-механических представлений на примерах лазерных систем.
2. Применение метода МО для расчета органических молекул.

3. Расчет корреляционных эффектов в рамках теории возмущений. Метод кластерного разложения.
4. Методы расчёты молекул с d –элементами.
5. Основы теории, представления об электронной плотности и вывод уравнений моделей Томаса-Ферми и Томаса-Ферми-Дирака.
6. Конформационный анализ органических молекул с помощью пакета GAMESS.
7. Методы моделирования колебательных спектров сложных молекул различной полярности.

Методические рекомендации по организации и выполнению самостоятельной работы студентов

Основой методики организации самостоятельной работы студентов по курсу является предоставление студентам необходимой для работы информации, а также обеспечение регулярных консультаций преподавателя и периодичной отчетности по различным видам учебной и самостоятельной деятельности.

В открытом доступе для студентов размещается следующая информация:

- программа курса с указанием основной и дополнительной литературы;
- учебно-методические материалы;
- график консультаций преподавателя;
- вопросы для проведения зачета.

Рекомендации по контролю качества усвоения знаний и проведению аттестации

Для текущего контроля качества усвоения знаний по дисциплине рекомендуется использовать тестовые задания по разделам дисциплины, защиту реферативных работ, устные опросы. Контрольные мероприятия проводятся в соответствии с учебно-методической картой дисциплины. В случае неявки на контрольное мероприятие по уважительной причине студент вправе по согласованию с преподавателем выполнить его в дополнительное время. Для студентов, получивших неудовлетворительные оценки за контрольные мероприятия, либо не явившихся по неуважительной причине, по согласованию с преподавателем и с разрешения заведующего кафедрой мероприятие может быть проведено повторно.

Защита реферативных работ проводится в форме индивидуальных выступлений-презентаций с последующей дискуссией. Оценка рефератов проводится по десятибалльной шкале.

Текущая аттестация по учебной дисциплине проводится в форме экзамена, к экзамену допускаются студенты, чья оценка текущей

успеваемости не ниже 4 баллов. Экзаменационная оценка и оценка текущей успеваемости служат для определения рейтинговой оценки по дисциплине, которая рассчитывается как средневзвешенная оценка текущей успеваемости и экзаменационной оценки. Итоговая оценка рассчитывается по формуле:

$$\text{итог} = 0,4 \text{ текущая} + 0,6 \text{ экзамен}$$

где итог – итоговая оценка, текущая – оценка текущей успеваемости, экзамен – экзаменационная оценка, 0,4 и 0,6 – весовые коэффициенты текущей успеваемости и экзаменационной оценки соответственно.

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ
ПО ИЗУЧАЕМОЙ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ
С ДРУГИМИ ДИСЦИПЛИНАМИ СПЕЦИАЛЬНОСТИ

Название дисциплины, с которой требуется согласование	Название Кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы по изучаемой учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
Экспертные системы распознавания веществ	Кафедра лазерной физики и спектроскопии	Оставить содержание учебной дисциплины без изменения	Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте (протокол № 12 от 26 мая 2017 г)
Экспериментальная спектроскопия	Кафедра лазерной физики и спектроскопии, кафедра физической оптики и прикладной информатики.	Оставить содержание учебной дисциплины без изменения	Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте (протокол № 12 от 26 мая 2017 г)
Введение в молекулярную спектроскопию	Кафедра лазерной физики и спектроскопии, кафедра физической оптики и прикладной информатики	Оставить содержание учебной дисциплины без изменения	Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте (протокол № 12 от 26 мая 2017 г)
Моделирование процессов взаимодействия лазерного излучения с веществом	Кафедра лазерной физики и спектроскопии	Оставить содержание учебной дисциплины без изменения	Рекомендовать к утверждению учебную программу в представленном варианте (протокол № 12 от 26 мая 2017 г)

ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ
ПО ИЗУЧАЕМОЙ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ
на ____ / ____ учебный год

№ № пп	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
(протокол № ____ от _____ 20__ г.)

Заведующий кафедрой
лазерной физики и спектроскопии
д.ф.-м.н., профессор

_____ Е.С. Воропай

УТВЕРЖДАЮ
Декан физического факультета
д.ф.-м.н., профессор

_____ В.М. Анищик