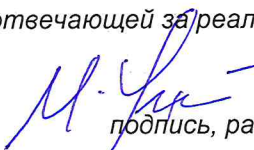


МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
теоретической физики
наименование кафедры, отвечающей за реализацию дисциплины

 (Фролов М.В.)
подпись, расшифровка подписи

. .2022 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.10 – Компьютерная обработка и расчет атомных и молекулярных спектров

Код и наименование дисциплины в соответствии с учебным планом

1. Код и наименование направления подготовки/специальности:

03.03.02 – физика

2. Профиль подготовки/специализация: Физика лазерных и спектральных технологий

3. Квалификация выпускника: бакалавр

4. Форма обучения: очная (дневная)

5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: 0802 – теоретической физики

6. Составители программы Корнев Алексей Станиславович

д.ф.-м.н. доцент

ученая степень

ученое звание

7. Рекомендована: НМС физического факультета от 17.06.2022 г. протокол № 6
(наименование рекомендующей структуры, дата, номер протокола)

8. Учебный год: 2025 - 2026

Семестр(ы)/Триместр(ы): 8

9. Цели и задачи учебной дисциплины: Лабораторный практикум "Компьютерная обработка и расчет атомных и молекулярных спектров" входит в образовательный цикл студентов бакалавров физического факультета, обучающихся по направлению "Физика лазерных и спектральных технологий". В рамках данного цикла студентов знакомят с основными вычислительными методами для работы со спектрами атомов и молекул. Цель настоящего курса заключается в освоении теоретических основ и практического использования численных квантово-химических методов исследования атомно-молекулярных систем в оптическом диапазоне энергий. В ходе освоения данного курса студенты знакомятся с современными программными продуктами, предназначенными как для общего анализа данных (Origin), так и для решения специфических задач квантовой механики и квантовой химии (численные реализации методов Хартри–Фока(–Дирака): Fisher, MCHF, HFD, x2DHF, метода гауссовых орбиталей: Gaussian, NWChem, Gabedit). Курс представляется интересным как для экспериментатора, так и теоретика: экспериментатор знакомится с методами теоретической интерпретации полученных экспериментальных результатов, а теоретик получает представление об основных методах обработки экспериментальных данных по спектрам атомов и молекул для их последующей теоретической интерпретации.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП: Дисциплина "Компьютерная обработка и расчет атомных и молекулярных спектров" относится к части Б1, формируемой участниками образовательных отношений, блока дисциплин направления подготовки 03.03.02 «Физика» с профилем подготовки «Физика лазерных и спектральных технологий». Изучение дисциплины проводится на базе прочитанных общих курсов по квантовой теории, математического анализа, линейной алгебры и численных методов. Необходимо также знания о методах теоретического описания квантовых систем, состоящих из тождественных частиц (методы самосогласованного поля, Хартри–Фока, функционала плотности) применительно к атомам и простейшим молекулам.

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями) и индикаторами их достижения:

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ПК-1	Способность анализировать существующие технические решения для реализации параметров разрабатываемых лазерных устройств	ПК-1.1	Демонстрирует глубокие современные знания в области технологий приборов квантовой электроники и фотоники на основе наногетероструктур	Знать: основные методы обработки и расчета атомных и молекулярных спектров; Уметь: вычислять параметры имеющих оптических спектров и получать самостоятельно спектры атомов и простейших молекул на основе различных физических моделей; Владеть: современными программными пакетами для анализа и получения спектров атомов и молекул с использованием ЭВМ
ПК-4	Способность создавать базы данных о физических свойствах и технологических особенностях наноструктурных материалов	ПК-4.2	Определяет степень достоверности результатов экспериментальных спектральных исследований и составляет реестр параметров наноструктурных материалов	

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час. (в соответствии с учебным планом) — 2 / 72.

Форма промежуточной аттестации (зачет/экзамен) зачет

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость			
	Всего	По семестрам		
		8		...
Аудиторные занятия	36	36		
в том числе:	Лекции			
	практические			
	лабораторные	24	24	
	групповые консультации	12	12	
Самостоятельная работа	36	36		
в том числе: курсовая работа (проект)				
Форма промежуточной аттестации (экзамен – __ час.)	Зачет	Зачет		
Итого:	72	72		

13.1. Содержание дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК*
1. Лабораторные занятия			
1.1	Визуализация и обработка спектральных данных с помощью пакета Origin	Основы работы в пакете Origin. Импорт данных. Графическое отображение данных. Смещение и совмещение графиков. Многослойная визуализация. Корректировка спектров. Простые операции со спектрами. Сглаживание спектров. Аппроксимация спектров лоренцевыми, гауссовыми и псевдо-фойгтовыми функциями.	-
1.2	Реализации конечно-разностного метода Хартри–Фока (–Дирака) для атомов	Программа Fischer: расчет полной энергии, потенциала ионизации, параметров электронных орбиталей для заданной электронной конфигурации. Получение одноэлектронной радиальной волновой функции в табличной форме. Визуализация электронной плотности с помощью пакета Origin. Расчет радиальных матричных элементов. Программа MCHF: простейший многоконфигурационный расчет. Программа HFD: релятивистский расчет электронной структуры многозарядного иона с заданной конфигурацией возбужденного состояния, аналитическая аппроксимация большой и малой радиальных волновых функций заданной орбитали на больших расстояниях от ядра.	-
1.3	Конечно-разностный метод Хартри–Фока в двухатомных молекулах	Программа x2DNF: расчет структуры двухатомной молекулы для заданной электронной конфигурации. Исследование возбужденных состояний. Ускорение сходимости. Асимптотический вид молекулярных орбиталей.	-
1.4	Метод гауссовых орбиталей	Метод МО ЛКАО, преимущество гауссовых орбиталей по сравнению со слэторовыми. Программа Gaussian: структура входного файла,	

		методы расчета электронной структуры молекулы, базисные наборы. Расчет электронной структуры основного состояния с неподвижными ядрами. Формат WFN для волновой функции. Расчет мультипольных моментов и статической поляризуемости. Оптимизация геометрии молекулы, расчет частот нормальных колебаний и их относительных спектральных интенсивностей. Использование нестандартных базисных наборов. Многошаговые задачи. Прерывание и возобновление расчета. Взаимодействие с программой Gaussian через графическую оболочку Gabedit, визуализация электронной плотности молекулы. Исследование возбужденных состояний молекул.	
1.5	Расчет динамической поляризуемости молекулы	Понятие о программе NWChem, типы входных файлов. Расчет динамической поляризуемости молекулы многоконfigurационным методом с использованием высокопроизводительного компьютерного кластера. Сравнение с методом функционала плотности.	-
2. Групповые консультации			
2.1	Визуализация и обработка спектральных данных с помощью пакета Origin	Основы работы в пакете Origin. Импорт данных. Графическое отображение данных. Смещение и совмещение графиков. Многослойная визуализация. Корректировка спектров. Простые операции со спектрами. Сглаживание спектров. Аппроксимация спектров лоренцевыми, гауссовыми и псевдо-фойгтовыми функциями.	-
2.2	Реализации конечно-разностного метода Хартри–Фока(–Дирака) для атомов	Программа Fischer: расчет полной энергии, потенциала ионизации, параметров электронных орбиталей для заданной электронной конфигурации. Получение одноэлектронной радиальной волновой функции в табличной форме. Визуализация электронной плотности с помощью пакета Origin. Расчет радиальных матричных элементов. Программа MCHF: простейший многоконfigurационный расчет. Программа HFD: релятивистский расчет электронной структуры многозарядного иона с заданной конфигурацией возбужденного состояния, аналитическая аппроксимация большой и малой радиальных волновых функций заданной орбитали на больших расстояниях от ядра.	-
2.3	Конечно-разностный метод Хартри–Фока в двухатомных молекулах	Программа x2DNF: расчет структуры двухатомной молекулы для заданной электронной конфигурации. Исследование возбужденных состояний. Ускорение сходимости. Асимптотический вид молекулярных орбиталей.	-
2.4	Метод гауссовых орбиталей	Метод MO ЛКАО, преимущество гауссовых орбиталей по сравнению со слэторовыми. Программа Gaussian: структура входного файла, методы расчета электронной структуры молекулы, базисные наборы. Расчет электронной структуры основного состояния с неподвижными ядрами. Формат WFN для волновой функции. Расчет мультипольных моментов и статической поляризуемости. Оптимизация геометрии молекулы, расчет частот нормальных колебаний и их относительных спектральных интенсивностей. Использование нестандартных базисных наборов. Многошаговые задачи. Прерывание и	-

		возобновление расчета. Взаимодействие с программой Gaussian через графическую оболочку Gabedit, визуализация электронной плотности молекулы. Исследование возбужденных состояний молекул.	
2.5	Расчет динамической поляризуемости молекулы	Понятие о программе NWChem, типы входных файлов. Расчет динамической поляризуемости молекулы многоконфигурационным методом с использованием высокопроизводительного компьютерного кластера. Сравнение с методом функционала плотности.	-

* заполняется, если отдельные разделы дисциплины изучаются с помощью онлайн-курса. В колонке Примечание необходимо указать название онлайн-курса или ЭУМК. В других случаях в ячейки ставятся прочерки.

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (часов)					
		Лекции	Практ.	Лаб.	ГК	Самостоятельная работа	Всего
1	Визуализация и обработка спектральных данных с помощью пакета Origin			4	2	6	12
2	Реализации конечно-разностного метода Хартри–Фока(–Дирака) для атомов			8	4	12	24
3	Конечно-разностный метод Хартри–Фока в двухатомных молекулах			2	1	3	6
4	Метод гауссовых орбиталей			8	4	12	24
5	Расчет динамической поляризуемости молекулы			2	1	3	6
	Итого:			24	12	36	72

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины:

(рекомендации обучающимся по освоению дисциплины: указание наиболее сложных разделов, работа с конспектами лекций, презентационным материалом, рекомендации по выполнению курсовой работы, по организации самостоятельной работы по дисциплине и др.)

Необходимо готовиться к лабораторным занятиям, разбирая соответствующий теоретический материал, систематически выполнять задания для самостоятельной работы, не пропускать текущие лабораторные занятия и регулярно сдавать выполненные работы.

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины (список литературы оформляется в соответствии с требованиями ГОСТ и используется общая сквозная нумерация для всех видов источников)

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Фриш, С.Э. Оптические спектры атомов: учебное пособие / С.Э. Фриш. – СПб: Лань, 2010. – 644 с.
2	Бутырская, Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView / Е.В. Бутырская. – М.: Солон-Пресс, 2011. – 224 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
3	<i>Богданов, А.А. Визуализация данных в Microcal Origin / А.А. Богданов. – М: Альтекс-А. – 2003. – 104 с.</i>
4	<i>Froese-Fischer, C. Computational Atomic Structure: An MCHF Approach / C. Frouse-Fischer, T. Brage, L. Jonsson. – Bristol, UK: IoP Publishing Ltd. – 1997. – 840 p.</i>
5	<i>Kozlov, M.G. CI-MBPT: A package of programs for relativistic atomic calculations based on a method combining configuration interaction and many-body perturbation theory / M.G. Kozlov et al. // Comput. Phys. Commun. – 2015. – V. 195. – P. 199–213.</i>
6	<i>Kobus, J. A finite difference Hartree-Fock program for atoms and diatomic molecules / J. Kobus // Comput. Phys. Commun. – 2013. – V. 184. – P. 799–811.</i>

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет)*:

№ п/п	Ресурс
7	<i>Atomic Spectra DataBase NIST // https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database</i>
8	<i>Computational Chemistry Comparison and Benchmark DataBase: Release 20 (August 2019) // https://cccbdb.nist.gov/</i>
9	<i>Charlotte Froese-Fischer: Research Professor of Computer Science // https://web.archive.org/web/20100423200057/http://www.vuse.vanderbilt.edu/~cff/cff.html</i>
10	<i>x2DHF: Two-Dimensional Finite Difference Hartree-Fock Program // https://github.com/susilehtola/x2dhf</i>
11	<i>Gaussian.com: Expanding the Limits of Computational Chemistry // http://gaussian.com</i>
12	<i>Gabedit: a Graphical User Interface to Computational Chemistry Packages // http://gabedit.sourceforge.net/</i>
13	<i>NWChem: Open Source High-Performance Computational Chemistry // http://www.nwchem-sw.org</i>

* Вначале указываются ЭБС, с которыми имеются договора у ВГУ, затем открытые электронно-образовательные ресурсы, онлайн-курсы, ЭУМК

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы (учебно-методические рекомендации, пособия, задачки, методические указания по выполнению практических (контрольных), курсовых работ и др.)

17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ, электронное обучение (ЭО), смешанное обучение):

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

доска, персональные компьютеры с доступом в Интернет, высокопроизводительный компьютерный кластер, учебная литература.

19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1.	Разделы 1.1 – 1.5, 2.1 – 2.5	ПК – 1	ПК – 1.1	Устный опрос Отчет о выполнении практического задания
		ПК - 4	ПК – 4.2	
Промежуточная аттестация форма контроля – зачет				Список вопросов к зачету

20. Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

20.1. Текущий контроль успеваемости

Текущий контроль успеваемости осуществляется в форме устного опроса.
Список вопросов для устного опроса:

Текущая аттестация №1 (контрольные вопросы)

1. Представление спектральной интенсивности лоренцевой, гауссовой и псевдо-фойгтовой функциями в пакете Origin.
2. Система уравнений Хартри–Фока для атома.
3. Вид радиальной волновой функции атомной орбитали в асимптотически далекой области.
4. «Двумерные» уравнения Хартри–Фока для двухатомной молекулы.
5. Асимптотический вид орбитали двухатомной молекулы.
6. Слэтерова орбиталь: преимущества и недостатки.

Текущая аттестация №2 (контрольные вопросы)

1. Гауссова орбиталь: преимущества и недостатки.
2. Структура входного файла программы Gaussian.
3. Форматы спецификации молекулы для программы Gaussian.
4. Формат WFN для волновой функции молекулы в декартовом базисе.
5. Общие свойства колебательных спектров многоатомных молекул. Нормальные колебания в молекуле воды.
6. Методы расчета электронной структуры в программе Gaussian: достоинства и недостатки.

Описание технологии проведения.

Опрос проходит в устной форме и состоит из трех вопросов.

Требования к выполнению заданий (или шкалы и критерии оценивания)

Оценка «зачтено»: даны правильные и полные ответы на 2 или 3 вопроса.

Оценка «не зачтено»: даны правильные и полные ответы не более, чем на 1 вопрос.

20.2. Практические задания

1. Выполнить аппроксимацию заданной спектральной интенсивности лоренцевой, гауссовой и псевдо-фойгтовой функциями.
2. Рассчитать структуру нейтрального атома фтора в основном состоянии.
3. Рассчитать структуру натриеподобного иона ксенона в основном состоянии и получить асимптотический вид волновой функции внешнего электрона на больших расстояниях.
4. Рассчитать и визуализировать электронную плотность молекулы воды, ее мультипольные моменты и поляризуемость с использованием различных методов и базисных наборов.
5. Рассчитать электронный интеграл перекрытия между нейтральной молекулой воды и ее катионом.
6. Рассчитать частоты и относительные спектральные интенсивности нормальных колебаний молекулы воды с использованием различных методов и базисных наборов.

7. Рассчитать динамическую поляризуемость молекулы водорода методом связанных кластеров для заданных значений частоты лазерного поля

20.3. Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Список вопросов для проведения зачета
(*наименование оценочного средства промежуточной аттестации*)

1. Представление спектральной интенсивности лоренцевой, гауссовой и псевдо-фойгтовой функциями в пакете Origin.
2. Система уравнений Хартри–Фока для атома.
3. Вид радиальной волновой функции атомной орбитали в асимптотически далекой области.
4. «Двумерные» уравнения Хартри–Фока для двухатомной молекулы.
5. Асимптотический вид орбитали двухатомной молекулы.
6. Слэтерова орбиталь: преимущества и недостатки.
7. Гауссова орбиталь: преимущества и недостатки.
8. Структура входного файла программы Gaussian.
9. Форматы спецификации молекулы для программы Gaussian.
10. Формат WFN для волновой функции молекулы в декартовом базисе.
11. Общие свойства колебательных спектров многоатомных молекул. Нормальные колебания в молекуле воды.
12. Методы расчета электронной структуры в программе Gaussian: достоинства и недостатки.

Описание технологии проведения

Зачет проходит в письменной форме. Студенту предлагается 6 вопросов из полного списка вопросов, на которые он должен дать краткий ответ в течение одного академического часа.

Требования к выполнению заданий, шкалы и критерии оценивания

«Зачтено»: даны правильные и полные ответы на 4 и более вопросов, допускаются погрешности, которые студент способен скорректировать под руководством преподавателя

«Не зачтено»: правильные и полные ответы даны на менее, чем 4 вопроса; ответы на вопросы содержат неточности и ошибки, которые студент не способен скорректировать под руководством преподавателя.