

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

УТВЕРЖДАЮ  
Заведующий кафедрой  
теоретической физики

 (Фролов М.В.)

02.07.2018 г.

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.19 – 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 (степень) выпускника: бакалавр

4. Форма обучения: очная (дневная)

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

6. Составители программы: Корнев Алексей Станиславович

ФИО

д.ф.-м.н.

доцент

ученая степень

ученое звание

a-kornev@yandex.ru

физический

e-mail

факультет

теоретической физики

Кафедра

7. Рекомендована: НМС физического факультета от 27.06.2018 г., протокол № 6  
(наименование рекомендующей структуры, дата, номер протокола)

отметки о продлении вносятся вручную)

8. Учебный год: 2021-2022

Семестр(-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 вариативной части блока дисциплин направления подготовки 03.03.02 «Физика» с профилем подготовки «Теоретическая физика». Изучение дисциплины проводится на базе прочитанных общих курсов по теоретической физике, 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 выпускников):**

Компетенция		Планируемые результаты обучения
Код	Название	
ОПК-1	способность использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, включая знания о предмете и объектах изучения, методах исследования, современных концепциях, достижениях и ограничениях естественных наук	<p>знать: основные методы обработки и расчета атомных и молекулярных спектров;</p> <p>уметь: вычислять параметры имеющихся оптических спектров и получать самостоятельно спектры атомов и простейших молекул на основе различных физических моделей;</p> <p>владеть (иметь навык(и)): современными программными пакетами для анализа и получения спектров атомов и молекул с использованием ЭВМ.</p>
ПК-5	способность пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации в избранной области физических исследований	

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

**Форма промежуточной аттестации (зачет/экзамен) – зачет.**

**13. Виды учебной работы:**

Вид учебной работы	Трудоемкость			
	Всего	По семестрам		
		8		...
Аудиторные занятия	24	24		
в том числе:				
лекции				
практические				
лабораторные	24	24		
Самостоятельная работа	48	48		
Форма промежуточной аттестации (зачет)				
Итого:	72	72		

### 13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
1.1	Визуализация и обработка спектральных данных с помощью пакета Origin	Основы работы в пакете Origin. Импортирование 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 x2DHF: 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 мультпольных 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 многоконфигурационным методом с использованием высокопроизводительного компьютерного кластера. Сравнение с методом функционала плотности.

### 13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Визуализация и обработка спектральных данных с помощью пакета Origin			4	8	12
2	Реализации конечно-разностного метода Хартри–Фока(–Дирака) для атомов			8	16	24
3	Конечно-разностный метод Хартри–Фока в двухатомных молекулах			2	4	6
4	Метод гауссовых орбиталей			8	16	24
5	Расчет динамической поляризуемости молекулы			2	4	6
	Итого:			24	48	72

### 14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

(рекомендации обучающимся по освоению дисциплины: работа с конспектами лекций, презентационным материалом, выполнение практических заданий, тестов, заданий текущей аттестации и т.д.)

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 интернета, 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 // <a href="https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database">https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database</a></i>
8	<i>Computational Chemistry Comparison and Benchmark DataBase: Release 20 (August 2019) // <a href="https://cccbdb.nist.gov/">https://cccbdb.nist.gov/</a></i>
9	<i>Charlotte Froese-Fischer: Research Professor of Computer Science // <a href="https://web.archive.org/web/20100423200057/http://www.vuse.vanderbilt.edu/~cff/cff.html">https://web.archive.org/web/20100423200057/http://www.vuse.vanderbilt.edu/~cff/cff.html</a></i>
10	<i>x2DHF: Two-Dimensional Finite Difference Hartree-Fock Program // <a href="https://github.com/susilehtola/x2dhf">https://github.com/susilehtola/x2dhf</a></i>
11	<i>Gaussian.com: Expanding the Limits of Computational Chemistry // <a href="http://gaussian.com">http://gaussian.com</a></i>
12	<i>Gabedit: a Graphical User Interface to Computational Chemistry Packages // <a href="http://gabedit.sourceforge.net/">http://gabedit.sourceforge.net/</a></i>
13	<i>NWChem: Open Source High-Performance Computational Chemistry // <a href="http://www.nwchem-sw.org">http://www.nwchem-sw.org</a></i>

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

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

**17. Информационные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы (при необходимости)**

Операционная система Debian

Программные пакеты: Origine, Fisher, MCHF, HFD, x2DHF, Gaussian, Gabedit, NWChem

**18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:**

(при использовании лабораторного оборудования указывать полный перечень, при большом количестве оборудования можно вынести данный раздел в приложение к рабочей программе)

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

**19. Фонд оценочных средств:**

**19.1. Перечень компетенций с указанием этапов формирования и планируемых результатов обучения**

Код и содержание компетенции (или ее)	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного)	Этапы формирования	ФОС*
---------------------------------------	-------------------------------------------------------------------	--------------------	------

части)	уровня освоения компетенции посредством формирования знаний, умений, навыков)	компетенции (разделы (темы) дисциплины или модуля и их наименование)	(средства оценивания)
<p>ОПК-1 способность использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, включая знания о предмете и объектах изучения, методах исследования, современных концепциях, достижениях и ограничениях естественных наук</p> <p>ПК-5 способность пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации в избранной области физических исследований</p>	Знать: основные методы обработки и расчета атомных и молекулярных спектров;	Разделы 1–4	Текущая аттестация №1 (тестовые задания)
	Уметь: вычислять параметры имеющихся оптических спектров и получать самостоятельно спектры атомов и простейших молекул на основе различных физических моделей;	Разделы 1–5	Текущая аттестация №2 (тестовые задания)
	Владеть: современными программными пакетами для анализа и получения спектров атомов и молекул с использованием ЭВМ	Разделы 1, 2, 4, 5	Практические задания
<b>Промежуточная аттестация</b>			КИМ

\* В графе «ФОС» в обязательном порядке перечисляются оценочные средства текущей и промежуточной аттестаций.

## 19.2 Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (результатов обучения) при промежуточной аттестации

Овладение основными навыками использования перечисленных методов и программных продуктов. Умение численно решать типовые задачи с помощью стандартных специализированных программных пакетов, умение графически анализировать полученные результаты.

Критерии оценок:

**Зачтено** – студент выполнил более 60% практических заданий; знает основной учебный материал, допуская погрешности в ответах, способен скорректировать ответ под руководством преподавателя.

**Не зачтено** – студент выполнил менее 60% практических заданий; не знает основной учебный материал, не способен скорректировать ответ под руководством преподавателя.

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
<i>Выполнение более 60% практических заданий; знание основного учебного материала, допускающее погрешности в ответах, способность скорректировать ответ под руководством преподавателя</i>	<i>Пороговый уровень</i>	<i>Зачтено</i>
<i>Выполнение менее 60% практических заданий; незнание основного учебного материала, неспособность скорректировать ответ под руководством преподавателя</i>	–	<i>Не зачтено</i>

### **19.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы**

#### **19.3.1 Перечень вопросов к зачету (КИМ):**

1. Назначение пакета Origin: основные возможности.
2. Ввод данных в Origin и их графическое представление.
3. Представление спектральной интенсивности лоренцевой, гауссовой и псевдо-фойгтовой функциями в пакете Origin.
4. Система уравнений Хартри–Фока для атома.
5. Система уравнений Хартри–Фока–Дирака для многозарядного иона.
6. Вид радиальной волновой функции атомной орбитали в асимптотически далекой области.
7. «Двумерные» уравнения Хартри–Фока для двухатомной молекулы.
8. Асимптотический вид орбитали двухатомной молекулы.
9. Слэтерова орбиталь: преимущества и недостатки.
10. Гауссова орбиталь: преимущества и недостатки.
11. Структура и предназначение гауссовых базисных наборов.
12. Структура входного файла программы Gaussian.
13. Информация, содержащаяся в спецификации задачи для программы Gaussian.
14. Форматы спецификации молекулы для программы Gaussian.
15. Формат WFN для волновой функции молекулы в декартовом базисе.
16. Вычисление мультипольных моментов и поляризуемостей программой Gaussian.
17. Общие свойства колебательных спектров многоатомных молекул. Нормальные колебания в молекуле воды.
18. Методы расчета электронной структуры в программе Gaussian: достоинства и недостатки.
19. Многошаговые задачи в пакете Gaussian. Прерывание и возобновление работы.
20. Многоконфигурационный расчет в программах квантовой химии. Метод связанных кластеров.

#### **19.3.2 Перечень практических заданий**

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 поляризуемости 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.

### 19.3.3 Текущие аттестации №1 – №2 (контрольные вопросы)

#### 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.

### 19.3.4 Перечень заданий для контрольных работ

### 19.3.5 Темы курсовых работ

### 19.3.6 Темы рефератов

## 19.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Оценка знаний, умений и навыков, характеризующая этапы формирования компетенций в рамках изучения дисциплины осуществляется в ходе текущей и промежуточной аттестаций.

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущая аттестация проводится в форме(ах): *устного опроса (индивидуальный опрос)*. Критерии оценивания приведены выше.

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования.

Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя теоретические вопросы, позволяющие оценить уровень полученных знаний и практическое задание, позволяющее оценить степень умения решать практические задачи. При оценивании используются количественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены выше.