

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
Акад. РАН, профессор


/С.Н.Калмыков/
«30» августа 2022 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Вторичное квантование на Python
(Python secondary quantization)

Уровень высшего образования:

Программа подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре

Физическая химия (104-01-00-144-хн-фмн)

Москва 2022

1. Краткая аннотация:

Название дисциплины - Вторичное квантование на Python (*Python secondary quantization*)

Цель изучения дисциплины – ознакомить обучающихся с современными алгоритмами, применяемыми при численном квантово-химическом моделировании, дать аспирантам навыки выбора наиболее эффективного варианта численной реализации в зависимости от поставленной научно-исследовательской задачи и доступных вычислительных ресурсов.

2. Уровень высшего образования – подготовка кадров высшей квалификации

3. Научная специальность: **1.4.4** Физическая химия, область науки: 1. Естественные науки

4. Место дисциплины (модуля) в структуре Программы аспирантуры: Обязательные Дисциплины (модули) – Обязательная дисциплина по выбору.

5. *Объем дисциплины (модуля) составляет 2 зачетных единицы, всего 72 часа, из которых 58 часов составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (36 часов – занятия лекционного типа, 12 часов – групповые консультации, 10 часов – текущий и промежуточный контроль успеваемости), 14 часов составляет самостоятельная работа обучающегося.*

6. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

На предыдущих уровнях высшего образования должны быть освоены общие курсы:

1. Линейная алгебра
2. Квантовая химия
3. Строение молекул
4. Численные методы квантовой химии

7. 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 к коллоквиумам	Всего
Тема 1. Общие сведения о языке Python, синтаксис, примеры простых программ.	3	3	-		-	-	3		-	
Тема 2. Знакомство со средой Jupiter Notebook.	6	3	-	2	-	-	5	1		1
Тема 3. Обзор свойств библиотек NumPy и SymPy, примеры использования для математических и символьных вычислений.	6	3	-		-	2	5	1	-	1
Тема 4. Различные способы представление волновой функции: детерминантное, строки заполнения, вторично-квантованное представление.	6	3	-	2	-	-	5	1	-	1

Тема 5. Алгебра операторов рождения и уничтожения, фермионные и бозонные системы.	4	3	-	-	-	-	3	1	-	1
Тема 6. Изучение библиотеки Second Quantization.	8	3	-	2	-	2	7	1	-	1
Тема 7. Теорема Вика, нормально-упорядоченная форма.	3	3	-		-	-	3		-	
Тема 8. Вывод явного вида операторов в вторично-квантованном виде с использованием библиотеки Second Quntization.	6	3	-	2	-	-	5	1		1
Тема 9. Одно- и двухчастичные матрицы плотности.	6	3	-		-	2	5	1	-	1
Тема 10. Спин-орбитали в формализме вторичного квантования.	5	3	-	2	-	-	5			
Тема 11. Спиновые тензорные операции и их вывод при помощи средств Python.	4	3	-		-	-	3	1	-	1
Тема 12. Двухчастичные операторы рождения, операторы возбуждения заданной мультиплетности.	8	3	-	2	-	2	7	1		1
Промежуточная аттестация: <u>зачет</u>	7	-	-	-	-	2	2	-	5	5
Итого	72	36	-	12		10	58	9	5	14

8. 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.

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

Аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и задания для самостоятельной работы, презентации к лекционным занятиям.

10. Ресурсное обеспечение:

Основная литература:

1. Любанович Б. Простой Python. Современный стиль программирования. -М: Питер, 2019, - 480 с.

Дополнительная литература:

1. Шолле Ф. Глубокое обучение на Python. -М: Питер, 2018, - 400 с.
2. Саммерфилд М. Программирование на Python 3. Подробное руководство. -М: Символ плюс, 2009, -604 с.

Описание материально-технической базы:

— занятия проводятся в компьютерном классе

11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватели:

*к.ф.-м.н., доц. Безруков Дмитрий Сергеевич,
кафедра физической химии химического факультета МГУ;
e-mail: dsbezrukov@gmail.com*

**Фонды оценочных средств,
необходимые для оценки результатов обучения**

Вопросы для промежуточной аттестации – зачета:

1. Общие сведения о языке Python, синтаксис, примеры простых программ.
2. Знакомство со средой JupyterNotebook.
3. Обзор свойств библиотек NumPy и SymPy, примеры использования для математических и символьных вычислений.
4. Различные способы представления волновой функции: детерминантное, строки заполнения, вторично-квантованное представление.
5. Алгебра операторов рождения и уничтожения, фермионные и бозонные системы
6. Изучение библиотеки Second Quantization
7. Теорема Вика, нормально-упорядоченная форма
8. Вывод явного вида операторов в вторично-квантованном виде с использованием библиотеки SecondQuantization
9. Одно- и двухчастичные матрицы плотности
10. Спин-орбитали в формализме вторичного квантования
11. Спиновые тензорные операции и их вывод при помощи средств Python
12. Двухчастичные операторы рождения, операторы возбуждения заданной мультиплетности.

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

Зачет проходит по билетам, включающем два вопроса. Уровень знаний аспиранта оценивается 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».

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка Результат	Незачёт (2)	Зачёт (3)	Зачёт (4)	Зачёт (5)
Знания	Отсутствие базовых знаний	Общие, но неглубокие знания, содержащие пробелы	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности принципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие навыков, не всегда верно используемых	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении поставленных задач