

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

**ПРОГРАММА**

повышения квалификации

**«Современные методы квантовой химии  
и высокопроизводительные вычисления»**

**(в рамках Инженерной школы МГУ имени М.В. Ломоносова)**

**(46 академических часов)**

Москва – 2024

## 1. Цель реализации программы

В настоящее время ключевыми вызовами при создании информационной среды в сфере прогнозирования безопасности и здоровья человека являются внедрение современных квантовых и цифровых технологий, включая разработку эффективных методов квантово-механического моделирования молекулярных процессов и развитие методов диагностики и мониторинга состояния живых систем.

Программа предназначена для повышения квалификации молодых специалистов в области применения современных методов квантовой химии, высокопроизводительных вычислений и методов искусственного интеллекта при разработке эффективных инженерных решений в сфере прогнозирования безопасности и здоровья человека. Курс дополнительного профессионального образования проходит в рамках Инженерной школы МГУ имени М.В. Ломоносова в формате летней выездной школы с привлечением ведущих специалистов из академических институтов, университетов и высокотехнологичных компаний России.

## 2. Формализованные результаты обучения

Слушатели получают теоретические и практические навыки использования современных методов квантовой химии, высокопроизводительных вычислений и методов искусственного интеллекта при решении прикладных междисциплинарных задач физики, химии и биологии.

В результате освоения программы курса слушатель:

1) должен знать:

основные математические и физические принципы построения современных методов квантовой химии для исследования структуры и динамики атомно-молекулярных систем;

границы применимости используемых средств квантовохимического моделирования физико-химических объектов и процессов;

возможности и ограничения расчетных методов квантовой химии при решении практических задач.

2) должен уметь:

оценить возможные источники ошибок при изучении систем различной природы, надежность и применимость различных методов моделирования физико-химических процессов;

обоснованно выбрать метод квантовохимического моделирования изучаемых физико-химических явлений;

применять известные квантовохимические методы к моделированию элементарных процессов.

3) должен владеть:

навыками проведения квантовохимического исследования при изучении реальных научных проблем в области химии, физики и биологии;

навыками использования аналитических и программных средств при решении прикладных физико-химических задач.

4) должен демонстрировать способность и готовность:

использовать полученные навыки в практической работе.

### 3. Содержание программы

Программа состоит из лекций ведущих специалистов химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова. Лекционный курс включает в себя теоретические основы современных методов квантовой химии и их использование в различных областях физики, химии и биологии для решения прикладных научно-исследовательских и инженерных задач. Особое внимание уделяется высокопроизводительным вычислениям и применению методов машинного обучения. Программа включает в себя проведение круглых столов для обсуждения со слушателями современных проблем химической физики и теоретической химии, а также стендовых сессий с представлением слушателями докладов в рамках тематики школы.

#### Учебный план

программы повышения квалификации

**«Современные методы квантовой химии и высокопроизводительные вычисления» (в рамках Инженерной школы МГУ имени М.В. Ломоносова)**

Категория слушателей (требования к слушателям) – Курс ориентирован на специалистов в области химии, физики, программирования с незаконченным высшим и высшим образованием и действующих инженерных кадров.

Срок обучения – 46 академических часов.

Форма обучения – очная (дневная)

№ п/п	Наименование Разделов	Всего, час.	В том числе	
			Лекции	Семинары и практич. занятия
1	<b>Современные методы квантовой химии</b>	13	8	5
2	<b>Высокопроизводительные вычисления и алгоритмы машинного обучения</b>	11	6	5
3	<b>Квантовая химия в физических приложениях</b>	9	4	5
4	<b>Фотохимия молекул при линейном и нелинейном возбуждении</b>	11	6	5
	<b>Итоговая аттестация (зачет)</b>	2		
	<b>ВСЕГО</b>	<b>46</b>	<b>24</b>	<b>20</b>

Учебно-тематический план  
 программы повышения квалификации  
 «Современные методы квантовой химии и высокопроизводительные  
 вычисления» (в рамках Инженерной школы МГУ имени М.В. Ломоносова)

№ п/п	Наименование разделов и тем	Всего, час.	В том числе	
			лекции	Семинары и практич. занятия
1	2	3	4	5
<b>1</b>	<b>Современные методы квантовой химии</b>	<b>13</b>	<b>8</b>	<b>5</b>
1.1	Метод связанных кластеров	2	2	0
1.2	Формализм функций Грина в задачах квантовой химии и молекулярной спектроскопии	2	2	0
1.3	Релятивистский метод связанных кластеров в пространстве Фока	2	2	0
1.4	Многоконфигурационная теория возмущений	2	2	0
1.5	Базовые принципы и условия применимости методов квантовой химии для моделирования структуры и свойств атомно-молекулярных систем	5	0	5
<b>2</b>	<b>Высокопроизводительные вычисления и алгоритмы машинного обучения</b>	<b>11</b>	<b>6</b>	<b>5</b>
2.1	Применение алгоритмов машинного обучения при изготовлении материалов и высокотехнологичной продукции	2	2	0
2.2	Инструменты машинного обучения для решения прикладных задач химии	2	2	0
2.3	Суперкомпьютерные технологии в инженерно-физическом моделировании	2	2	0
2.4	Коллаборация науки и индустриального сектора в сфере квантовой инженерии	5	0	5
<b>3</b>	<b>Квантовая химия в физических приложениях</b>	<b>9</b>	<b>4</b>	<b>5</b>
3.1	Молекулярная спектроскопия и астрофизика	2	2	0
3.2	Радиационные аспекты моделирования климата и дистанционного зондирования природных и антропогенных процессов	2	2	0
3.3	Классическая и квантовая динамика межмолекулярных взаимодействий	5	0	5
<b>4</b>	<b>Фотохимия молекул при линейном и нелинейном возбуждении</b>	<b>11</b>	<b>6</b>	<b>5</b>
4.1	Фемтосекундная лазерная спектроскопия с временным разрешением	2	2	0
4.2	Методы квантовой молекулярной динамики для исследования сверхбыстрых неадиабатических процессов релаксации электронно-возбужденных молекул	2	2	0

4.3	Нелинейное поглощение коррелированных и некоррелированных пар фотонов молекулами	2	2	0
4.4	Фотоиндуцированная неадиабатическая динамика биомолекулярных систем	5	0	5
	Итоговая аттестация (зачет)	2		
	<b>ВСЕГО</b>	<b>46</b>	<b>24</b>	<b>20</b>

#### 4. Материально-технические условия реализации программы

Преподавание курса в форме авторских лекций ведущих специалистов России и проведения круглых столов с активным вовлечением слушателей в тематические дискуссии по современным проблемам химической физики и теоретической химии.

Проектор или большой монитор – 1 шт.

#### 5. Учебно-методическое обеспечение программы

Слушателям предоставляются материалы лекций в виде презентаций. По теме каждого занятия указываются источники в текущей научной периодической литературе.

Перечень дополнительной учебной литературы и электронные ресурсы:

1. Степанов Н.Ф., Пупышев В.И. Квантовая механика молекул и квантовая химия Москва: Издательство Московского Университета, 1991.
2. Szabo A., Ostlund N.S. Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory (Revised Edition). New York: Dover, 1996.
3. Хрустов В.Ф. Современные методы квантовой химии. Методическое пособие, Ч. I-II. Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 2022. <https://phys.chem.msu.ru/quantum-chemistry/>
4. Зайцевский А.В. Релятивистская теория электронного строения молекул. Методическое пособие. Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 2005. <http://qchem.pnpi.spb.ru/Andrei>
5. Bochenkova A.V. Multiconfigurational methods including XMCQDPT2 theory for excited states of light-sensitive biosystems. In Comprehensive Computational Chemistry (First Edition), vol. 4, pp. 141–157, Oxford, Elsevier, 2024.
6. Kazakov K.V. Uncommon paths in quantum physics. Elsevier, 2014.
7. Банкер Ф., Йенсен П. Симметрия молекул и спектроскопия. Изд. 2. Москва: Мир. 2004.
8. Quantum Chemistry in the Age of Machine Learning, Dral P.O., Ed. Elsevier, 2023.

#### 6. Требования к результатам обучения

Слушатели получают теоретические и практические навыки использования современных методов квантовой химии, высокопроизводительных вычислений и методов искусственного интеллекта при решении прикладных междисциплинарных задач физики, химии и биологии.

Итоговая аттестация будет проходить в форме интерактивного недифференцированного зачета, на котором от слушателей потребуется представить стендовые доклады по тематике школы и продемонстрировать полученные знания в области современных методов квантовой химии при решении практических задач.

## **7. Составители программы**

Боченкова Анастасия Владимировна, к.ф.-м.н., доцент, зав. лаб., химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Казakov Константин Вячеславович, д.ф.-м.н., в.н.с., химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия