



**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

**«ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ФГБОУ ВО «ИГУ»**

Кафедра общей и неорганической химии

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,



А.И. Вильмс
15.04.2022 г.

Рабочая программа дисциплины ФТД.02

Наименование дисциплины: **Надежность современных методов вычислительной химии**

Рекомендуется для направления подготовки: **04.03.01 «Химия»**

Направленность **Химия.**

Степень (квалификация) выпускника: **Бакалавр**

Согласовано с УМК химического
факультета

Протокол №4 от 15.04.2022 г.

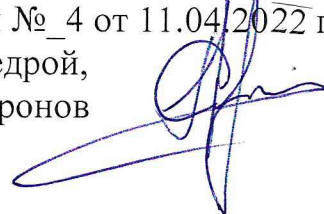
Председатель  А.И. Вильмс

Рекомендовано кафедрой

Общей и неорганической химии,

Протокол №_4 от 11.04.2022 г.

Зав. кафедрой,
А.Ю.Сафронов



Иркутск 2022 г.

Содержание

	стр.
1. Цели и задачи дисциплины	3
2. Место дисциплины в структуре ОПОП.	3
3. Требования к результатам освоения дисциплины	4
4. Содержание и структура дисциплины	5
4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам	5
4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	6
4.3 Содержание учебного материала	8
4.3.1 Перечень семинарских, практических занятий, лабораторных работ, план самостоятельной работы студентов, методические указания по организации самостоятельной работы студентов	8
4.3.2 Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение самостоятельной работы студентов	9
4.3.3 Методические указания по организации самостоятельной работы студентов	9
4.4 Примерная тематика курсовых работ (проектов) (при наличии)	9
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины:	9
а) основная литература;	9
б) дополнительная литература;	10
в) периодические издания;	10
г) список авторских методических разработок;	10
д) базы данных, поисково-справочные и информационные системы	10
6. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)	10
7. Образовательные технологии	11
8. Оценочные средства (ОС)	11

I. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ:

Цели: формирование базовых представлений о современных методах квантовохимического моделирования и навыков выбора методов вычислительной химии, адекватных решаемой проблеме.

Задачи:

1. дать представление о современных квантовохимических методах исследования строения и свойств химических соединений, методах моделирования механизмов реакций;
2. научить студентов химического факультета правильно ориентироваться в иерархической системе квантовохимических расчетных схем;
3. сформировать умение применять на практике полученные знания.

II. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

2.1. Учебная дисциплина «Надежность современных методов вычислительной химии» относится к факультативной дисциплинам по выбору вариативной части учебного плана подготовки бакалавров по направлению 04.03.01 - Химия (**ФТД.02**).

2.2. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими дисциплинами, а именно:

«Математика» (Б1.О.10),
«Общая химия. Химия неметаллов» (Б1.О.16),
«Органическая химия» (Б1.О.20),
«Информатика» (Б1.О.22),
«Информатика и вычислительная техника» (Б1.О.23),
«Физическая химия. Химическая термодинамика» (Б1.О.24),
«Физическая химия. Электрохимия. Химическая кинетика и катализ» (Б1.О.25),
«Квантовая механика» (Б1.О.30),
«Математическая теория эксперимента» (Б1.В.02).

2.3 Перечень последующих учебных дисциплин программы бакалавриата по направлению 04.03.01, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной:

«Компьютерное моделирование молекулярных систем: от схемы до механизма реакции» (ФТД.03),
«Преддипломная практика» (Б2.О.01(Пд)),
«Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы» (Б3.01(Д)),

и магистратуры по направлению 04.04.01:

«Квантовая химия» (Б1.О.04),
«Информационные технологии в химических исследованиях» (Б1.В.08),
«Компьютерные технологии в науке» (Б1.О.05),
«Преддипломная практика» (Б2.О.01(Пд)),
«Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы» (Б3.01(Д)).

III. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование компетенций (элементов следующих компетенций) в соответствии с ФГОС ВО и ОП ВО по данному направлению подготовки 04.03.01 «Химия», профиль: Химия.

Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с индикаторами достижения компетенций

Компетенция	Индикаторы компетенций	Результаты обучения
ПК-6 Способен применять основные естественно-научные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	ИДК_{ПК6.1} Знает теоретические основы базовых химических дисциплин (неорганической, органической, аналитической, физической химии) и способы их использования при решении конкретных химических задач	Знать: современные подходы, используемые при моделировании пространственного и электронного строения молекулярных систем, механизмов реакций; возможности и ограничения расчетных методов квантовой химии при решении практических задач; Уметь: ориентироваться в иерархической системе квантовохимических расчетных схем, пользоваться современным программным обеспечением и профессиональными базами данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук; Владеть: навыками использования сети Интернет для поиска учебной и научной информации; современными квантово-химическими методами и программами.

IV. СОДЕРЖАНИЕ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Трудоемкость дисциплины составляет 1 зачетную единицу, 36 часов.

Форма промежуточной аттестации: *зачет*

4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)				Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
			Контактная работа преподавателя с обучающимися			Самостоятельная работа	
			Лекции	Семинарские (практические занятия)	КСР + консультации + КО		
1	Введение. Метод Хартри-Фока. Базисные наборы.	6	2	2	2	2	Устный опрос
2	Методы оптимизации геометрии и расчета колебательных поправок. Сравнение ab initio и ТФП подходов	6	2	2	2	2	Устный опрос
3	Расчеты энергетических характеристик. Учет электронной корреляции в методах ТФП, МРn, связанных кластеров и конфигурационного взаимодействия.	6	2	3	3	2	Устный опрос
4	Комбинированные подходы. Высокоточные комбинированные процедуры.	6	2	3	3	2	Устный опрос
Итого часов			8	10	10	8	Зачет

4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
6	Введение. Метод Хартри-Фока. Базисные наборы.	Решение задач на разбор обозначений базисных наборов, обоснование выбора базиса для решаемой задачи		2	устный опрос	см. список рекомендуемой литературы (1-5)
6	Методы оптимизации геометрии и расчета колебательных поправок. Сравнение ab initio и ТФП подходов.	Поиск и анализ литературы о методах, используемых для оптимизации геометрии молекулярной системы (систем), изучаемой в рамках НИР или ВКР		2	устный опрос	см. список рекомендуемой литературы (1, 2, 6, 8, 9, 10)
6	Расчеты энергетических характеристик. Учет электронной корреляции в методах ТФП, МРn, связанных кластеров и конфигурационного взаимодействия.	Поиск и анализ литературы о методах, используемых для расчета энергии молекулярной системы (систем), изучаемой в рамках НИР или ВКР		2	устный опрос	см. список рекомендуемой литературы (1, 2, 6, 7, 8, 9, 10)
6	Комбинированные подходы. Высокоточные комбинированные процедуры. Учет растворителя.	Подготовка презентации с обоснованием выбранной методики расчета для молекулярной системы (систем), изучаемой в рамках НИР или ВКР		2	Оценка презентации и защиты предлагаемого подхода	см. список рекомендуемой литературы (1, 2, 6, 7, 8, 9, 10)
Общая трудоемкость самостоятельной работы по дисциплине (час)				8		
Бюджет времени самостоятельной работы, предусмотренный учебным планом для данной дисциплины (час)				8		

Контактная работа может быть аудиторной, внеаудиторной, а также проводиться в электронной информационно-образовательной среде.

Контактная работа при проведении учебных занятий по дисциплинам (модулям) включает в себя:

занятия лекционного типа (лекции и иные учебные занятия, предусматривающие преимущественную передачу учебной информации педагогическими работниками организации и (или) лицами, привлекаемыми организацией к реализации образовательных программ на иных условиях, обучающимся),

занятия семинарского типа (семинары, практические занятия, практикумы, лабораторные работы, коллоквиумы и иные аналогичные занятия),

групповые консультации,

индивидуальную работу обучающихся с педагогическими работниками организации и (или) лицами, привлекаемыми организацией к реализации образовательных программ на иных условиях (в том числе индивидуальные консультации);

иную контактную работу (при необходимости), предусматривающую групповую или индивидуальную работу обучающихся с педагогическими работниками организации и (или) лицами, привлекаемыми организацией к реализации образовательных программ на иных условиях, определяемую организацией самостоятельно.

4.3 Содержание учебного материала

Содержание разделов и тем дисциплины

1. Введение. Метод Хартри-Фока. Базисные наборы.

Роль и место квантовохимических методов исследования в современной науке. Основные приближения квантовой химии: адиабатическое, одноэлектронное. Определитель Слейтера. Метод Хартри–Фока. Базис. Аббревиатуры наборов базисных функций и их смысл. Типы базисных наборов.

2. Методы оптимизации геометрии и расчета колебательных поправок. Сравнение *ab initio* и ТФП подходов.

Теория функционала плотности (ТФП). Обменно-корреляционные функционалы. Приближение локальной плотности (LDA). Обобщенное градиентное разложение (GGA). Гибридные функционалы. Сравнение результатов расчета геометрии и колебательных поправок в рамках методов Хартри–Фока и популярных методов ТФП.

3. Расчеты энергетических характеристик. Учет электронной корреляции в методах ТФП, МРn, связанных кластеров и конфигурационного взаимодействия.

Обзор методов учета электронной корреляции. Дважды-гибридные функционалы. Сравнение результатов расчета энергетических характеристик в рамках методов теории возмущений Мёллера-Плессета, дважды-гибридных функционалов, методов связанных кластеров.

4. Комбинированные подходы. Высокоточные комбинированные процедуры. Учет растворителя.

Принципы конструирования комбинированных расчетных схем. Обзор высокоточных комбинированных процедур G2MP2, G3, G4 и CBS-QB3. Обзор способов учета растворителя: континуальные, кластерные, кластерно-континуальные модели. Некоторые примеры выбора методики расчетов.

4.3.1. Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ

п/п	№ раздела и темы дисциплины	Наименование семинаров, практических и лабораторных работ	Трудоемкость (час.)	Из них практическая подготовка	Оценочные средства	Формируемые компетенции
1	2	3	4	5	6	7
1.	1	Метод Хартри-Фока. Базисные наборы.	2	2	устный опрос	ПК-6.1
2.	2	Методы оптимизации геометрии и расчета колебательных поправок.	2	2	устный опрос	ПК-6.1
3.	3	Учет электронной корреляции в методах ТФП, МРn, связанных кластеров и конфигурационного взаимодействия.	3	3	устный опрос	ПК-6.1
4.	4	Комбинированные подходы. Учет растворителя.	3	3	Оценка презентации и защиты предлагаемого подхода	ПК-6.1

4.3.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение самостоятельной работы студентов

№ п/п	Тема	Задание	Формируемая компетенция	ИДК
1	1	Решение задач на разбор обозначений базисных наборов, обоснование выбора базиса для решаемой задачи	ПК-6	<i>ИДК ПК-6.1</i>
2	2	Поиск и анализ литературы о методах, используемых для оптимизации геометрии молекулярной системы (систем), изучаемой в рамках НИР или ВКР	ПК-6	<i>ИДК ПК-6.1</i>
3	3	Поиск и анализ литературы о методах, используемых для расчета энергии молекулярной системы (систем), изучаемой в рамках НИР или ВКР	ПК-6	<i>ИДК ПК-6.1</i>
4	4	Подготовка презентации с обоснованием выбранной методики расчета для молекулярной системы (систем), изучаемой в рамках НИР или ВКР	ПК-6	<i>ИДК ПК-6.1</i>

4.3.3. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа студентов, связанная с закреплением теоретического материала в виде решения задач, поиска и анализа литературных данных о методах используемых для оптимизации геометрии и расчета энергии молекулярной системы (систем), изучаемой в рамках НИР или ВКР, а также в виде подготовки презентации с обоснованием выбора метода расчета для изучаемой в рамках своей научной работы молекулярной системы (систем), проводится во внеаудиторное время.

В ходе подготовки рекомендуется:

- Повторить лекционный материал.
- При необходимости обратиться к рекомендованной учебной литературе.
- Проработать задания, решаемые на практических занятиях.
- При необходимости обратиться за консультацией к преподавателю.

4.4. Примерная тематика курсовых работ (проектов) (при наличии)

Выполнение курсовых работ не планируется

V. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

а) основная литература

1. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия: Учеб. пособие / В.И. Барановский. - М.: Академия, 2008. - 383 с. - (Высшее профессиональное образование: Естественные науки). - Библиогр.: с. 379-380.
2. Трофимов А.Б. Введение в квантовую химию: учеб. пособие / А. Б. Трофимов; ред.: Н. М. Витковская, В. К. Станкевич; Иркутский гос. ун-т, Хим. фак. - Иркутск: Изд-во ИГУ, 2013. - 192 с.; 25 см. - Библиогр.: с. 180-181.

3. Кобычев В.Б. Квантовая механика для химиков. Конспекты лекций. Часть I. / В. Б. Кобычев, А. Б. Трофимов, Н. М. Витковская, – Иркутск: Издательство ООО «Издательство «Аспринт», 2015. – 120 с.
4. Кобычев В.Б. Квантовая механика для химиков. Конспекты лекций. Часть II. / В. Б. Кобычев, А. Б. Трофимов, Н. М. Витковская, – Иркутск: Издательство ООО «Издательство «Аспринт», 2018. – 124 с.
5. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. Учеб. пособие. / В.Г.Цирельсон.–М.:БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012.– 495 с. Режим доступа ЭБС издательства «Лань».

б) дополнительная литература

6. Майер И. Избранные главы квантовой химии / И. Майер; пер. с англ.– М.: Бином, Лаборатория знаний, 2014.– 384 с. Режим доступа ЭБС издательства «Лань».
7. Барановский В.И. Квантовохимические расчеты повышенной точности. Учебное пособие, 2015. – С. 89.



в) периодические издания (при необходимости)

8. Leszczynski J. Handbook of Computational Chemistry // Handbook of Computational Chemistry / ed. Leszczynski J. Dordrecht: Springer Netherlands, 2012. 1–1430 p.
9. Narbe Mardirossian & Martin Head-Gordon (2017) Thirty years of density functional theory in computational chemistry: an overview and extensive assessment of 200 density functionals, Molecular Physics, 115:19, 2315-2372, DOI: 10.1080/00268976.2017.1333644.
10. Bursch, M.; Mewes, J.; Hansen, A.; Grimme, S. Best Practice DFT Protocols for Basic Molecular Computational Chemistry**. Angew. Chemie Int. Ed. 2022, 61 (42). <https://doi.org/10.1002/anie.202205735>.

г) список авторских методических разработок:

д) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

11. <http://www.qchem.ru/lectures/>
Курс лекций по квантовой механике и квантовой химии, подготовленный д.х.н., проф. С.Л. Хурсаном (БашГУ)
12. <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/borschevskii/1part.pdf>
А.Я. Борщевский Строение атомных частиц. Водородоподобные атомы.
13. <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/borschevskii/2part.pdf>
А.Я. Борщевский Строение атомных частиц. Многоэлектронные атомы.

VI. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1. Учебно-лабораторное оборудование:

Помещения для проведения лекционных и практических занятий, укомплектованные необходимым оборудованием, а именно:

- аудитории, оснащенные мультимедийными средствами, для проведения аудиторных и практических занятий ауд. 5, 402, 426 оборудованы мультимедийными проекторами

(InFocus IN 105 (3D Ready), настенными экранами, ноутбуками Samsung NP 300T5A-A0FRU.

- компьютерный класс химического факультета (ауд. 209) оборудован 12 ПК Intel Pentium IV с установленным пакетом MS Office. Имеется локальная сеть.

6.2. Программное обеспечение:

Лицензируемое ПО:

- MS Excel в составе MS Office - 2016

Свободно распространяемые программы:

- Firefly – программа неэмпирических расчетов [Alex A. Granovsky, Firefly version 8, [www http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html](http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html)];
- Molecular Modeling and Simulation Kit (MaSK) для визуализации результатов расчетов Firefly, наглядного представления строения молекул и вида МО.

6.3. Технические и электронные средства:

VII. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В процессе изучения дисциплины «Надежность современных методов вычислительной химии» используются как традиционные, так и инновационные технологии, активные и интерактивные методы и формы обучения: объяснительно-иллюстративный метод с элементами проблемного изложения, технология профессионально-ориентированного обучения, лекции, самостоятельные работы, разбор конкретных ситуаций.

VIII. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Оценочные средства (ОС):

Оценочные средства текущего контроля формируются в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе университета. Назначение оценочных средств текущего контроля - выявить у обучающихся сформированность компетенций: ПК-6.

Материалы для проведения текущего и промежуточного контроля знаний студентов:

№	Вид контроля	Контролируемые темы (разделы)	Компетенции, компоненты которых контролируются
1	Участие в дискуссиях на семинарском занятии	Метод Хартри-Фока. Базисные наборы.	ПК-6.
2	Участие в дискуссиях на семинарском занятии	Методы оптимизации геометрии и расчета колебательных поправок.	ПК-6.
3	Участие в дискуссиях на семинарском занятии	Учет электронной корреляции в методах ТФП, МРn, связанных кластеров и конфигурационного	ПК-6.

		взаимодействия.	
4	Участие в дискуссиях на семинарском занятии	Комбинированные подходы. Учет растворителя.	ПК-6.

ВОПРОСЫ ДЛЯ СОБЕСЕДОВАНИЯ

Семинар №1. Метод Хартри-Фока. Базисные наборы.

1. Роль и место квантовохимических методов исследования в современной науке.
2. Основные приближения квантовой химии: адиабатическое, одноэлектронное.
3. Определитель Слейтера. Метод Хартри-Фока.
4. Базис. Аббревиатуры наборов базисных функций и их смысл. Типы базисных наборов.

Семинар №2. Методы оптимизации геометрии и расчета колебательных поправок.

1. Теория функционала плотности (ТФП). Обменно-корреляционные функционалы.
2. Приближение локальной плотности (LDA).
3. Обобщенное градиентное разложение (GGA).
4. Гибридные функционалы.
5. Сравнение результатов расчета геометрии и колебательных поправок в рамках методов Хартри-Фока и популярных методов ТФП.

Семинар №3. Учет электронной корреляции в методах ТФП, МРn, связанных кластеров и конфигурационного взаимодействия.

1. Методы учета электронной корреляции.
2. Дважды-гибридные функционалы.
3. Сравнение результатов расчета энергетических характеристик в рамках методов теории возмущений Мёллера-Плессета, дважды-гибридных функционалов, методов связанных кластеров.

Семинар №4. Комбинированные подходы. Учет растворителя.

1. Принципы конструирования комбинированных расчетных схем.
2. Высокоточные комбинированные процедуры G2MP2, G3, G4 и CBS-QB3.
3. Способы учета растворителя: континуальные, кластерные, кластерно-континуальные модели.

Промежуточная аттестация (*зачет*) проводится с использованием бально-рейтинговой системы оценивания результатов обучения.

ПРИМЕРНЫЙ ПЕРЕЧЕНЬ ВОПРОСОВ И ЗАДАНИЙ К ЗАЧЕТУ

1. Роль и место квантовохимических методов исследования в современной науке.
2. Основные приближения квантовой химии: адиабатическое, одноэлектронное.
3. Определитель Слейтера. Метод Хартри-Фока.
4. Базис. Аббревиатуры наборов базисных функций и их смысл. Типы базисных наборов.
5. Теория функционала плотности (ТФП). Обменно-корреляционные функционалы.

6. Приближение локальной плотности (LDA).
7. Обобщенное градиентное разложение (GGA).
8. Гибридные функционалы.
9. Сравнение результатов расчета геометрии и колебательных поправок в рамках методов Хартри–Фока и популярных методов ТФП.
10. Методы учета электронной корреляции.
11. Дважды-гибридные функционалы.
12. Сравнение результатов расчета энергетических характеристик в рамках методов теории возмущений Мёллера-Плессета, дважды-гибридных функционалов, методов связанных кластеров.
13. Принципы конструирования комбинированных расчетных схем.
14. Высокоточные комбинированные процедуры G2MP2, G3, G4 и CBS-QB3.
15. Способы учета растворителя: континуальные, кластерные, кластерно-континуальные модели.
16. Примеры выбора методики расчетов.

**ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ
КОМПЕТЕНЦИЙ**

Индикаторы достижения компетенции	Результаты обучения (знать, уметь, владеть)	Процедура оценивания
<i>ИДК_{ПК6.1}</i> Знает теоретические основы базовых химических дисциплин (неорганической, органической, аналитической, физической химии) и способы их использования при решении конкретных химических задач	Знает: современные подходы, используемые при моделировании пространственного и электронного строения молекулярных систем, механизмов реакций; возможности и ограничения расчетных методов квантовой химии при решении практических задач.	Выполнение практических заданий, работа на семинарах. Защита презентации с обоснованием выбранной методики расчета для молекулярной системы (систем), изучаемой в рамках НИР или ВКР
	Умеет: ориентироваться в иерархической системе квантовохимических расчетных схем, пользоваться современным программным обеспечением и профессиональными базами данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук.	
	Владеет: навыками использования сети Интернет для поиска учебной и научной информации; современными квантово-химическими методами и программами.	

Программа оценивания контролируемых компетенций:

Тема или раздел дисциплины ¹	Код индикатора компетенции	Планируемый результат	Показатель	Критерий оценивания	Наименование ОС ²	
					ТК ³	ПА ⁴
Метод Хартри-Фока. Базисные наборы.	ИДК_{ПК}-6.1 Знает теоретические основы базовых химических дисциплин (неорганической, органической, аналитической, физической химии) и способы их использования при решении конкретных химических задач	Знать: теоретические основы решения уравнения Шредингера методом Хартри-Фока, построения базисных наборов. Уметь: определять смысл принятых обозначений базисных наборов, обосновывать выбор базиса для решаемой задачи	Знает: основные приближения квантовой химии: адиабатическое, одноэлектронное; аббревиатуры наборов базисных функций и их смысл; типы базисных наборов. Умеет: обосновывать выбор базисного набора для решаемой задачи	Владеет материалом, представленным в разделе «Вопросы для собеседования», семинар 1, № 1-4. Активно отвечал на семинарах. Выполнил 2/3 самостоятельной работы.	УО, ПЗ	Зачет
Методы оптимизации геометрии и расчета колебательных поправок.		Знать: теоретические основы популярных методов оптимизации геометрии и расчета колебательных поправок. Уметь: ориентироваться в современных методах	Знает: используемые для оптимизации геометрии и расчета колебательных поправок методы: общую характеристику, границы и области применения. Умеет: обосновывать выбор метода оптимизации геометрии и расчета колебательных поправок для решаемой задачи	Владеет материалом, представленным в разделе «Вопросы для собеседования», семинар 2, № 1-5. Активно отвечал на семинарах. Выполнил 2/3 самостоятельной работы.		

		оптимизации геометрии и расчета колебательных поправок Владеть: навыками выбора адекватного задаче метода оптимизации геометрии и расчета колебательных поправок	Владеет: навыками анализа и отбора наиболее адекватных задаче методов оптимизации геометрии и расчета колебательных поправок, а также построения собственных вариантов расчетных схем.			
Учет электронной корреляции в методах ТФП, МРn, связанных кластеров и конфигурационного взаимодействия.		Знать: теоретические основы популярных методов расчета энергетических характеристик для молекулярных систем и реакций Уметь: ориентироваться в современных методах расчета энергетических характеристик для молекулярных систем и реакций Владеть: навыками выбора адекватного задаче метода	Знает: методы, используемые для расчета энергетических характеристик молекулярных систем и реакций: общую характеристику, границы и области применения. Умеет: обосновывать выбор метода расчета энергетических характеристик молекулярных систем и реакций для решаемой задачи. Владеет: навыками анализа и отбора наиболее адекватных задаче методов расчета энергетических	Владеет материалом, представленным в разделе «Вопросы для собеседования», семинар 3, № 1-3. Активно отвечал на семинарах. Выполнил 2/3 самостоятельной работы.	УО, ПЗ	

		расчета энергетических характеристик для молекулярных систем и реакций	характеристик молекулярных систем и реакций, а также построения собственных вариантов расчетных схем.			
Комбинированные подходы. Учет растворителя.		Знать: теоретические основы конструирования комбинированных расчетных схем, высокоточных комбинированных процедур, методов учета растворителя Уметь: ориентироваться в принципах конструирования комбинированных расчетных схем, способах учета растворителя	Знает: знает принципы конструирования расчетных схем; методы высокоточных комбинированных процедур: общую характеристику, границы и области применения. Умеет: обосновывать выбор полной расчетной схемы, способы учета растворителя.	Владеет материалом, представленным в разделе «Вопросы для собеседования», семинар 4, № 1-3. Активно отвечал на семинарах. Представил и защитил презентацию с обоснованием выбора метода расчета для предполагаемой НИР или ВКР	УО, Презентация	

УО – устный опрос, ПЗ – практическое задание.

КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ:

а) промежуточная аттестация - зачет

В соответствии с бально-рейтинговой системой ИГУ для получения зачета по дисциплине «Надежность современных методов вычислительной химии» студенту необходимо набрать не менее 60 баллов.

1. Обязательным условием является выполнение студентом 4 практических заданий по данной дисциплине, подготовка и защита презентации по теме выбора методики расчета. При выполнении практических заданий оценивается полнота решенных задач, в защите презентации оценивается стройность доклада, качество иллюстративного материала, ответы на вопросы.

2. Отчет по каждой практической работе оценивается в 20 баллов. Оценивается полнота и правильность выполненного задания, а также сроки предоставления.

3. Подготовка и защита презентации оценивается в 40 баллов.

Разработчик:

канд. хим. наук В.Б. Орел



Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учетом рекомендаций ПООП по направлению и профилю подготовки 04.03.01 – «Химия».

Программа рассмотрена на заседании кафедры общей и неорганической химии «11» апреля 2022 г. Протокол № 4

Зав. кафедрой / А.Ю. Сафронов /

Настоящая программа, не может быть воспроизведена ни в какой форме без предварительного письменного разрешения кафедры-разработчика программы.

