

Аннотация

к рабочей программе дисциплины курса «Квантовая химия»

Направление: 03.04.02 Физика

Направленность (профиль): Общая и фундаментальная физика

Программа дисциплины «Квантовая химия» составлена в соответствии с требованиями СУОС к уровню магистратуры по направлению подготовки 03.04.02 Физика, направленность «Общая и фундаментальная физика», а также задачами, стоящими перед Новосибирским государственным университетом по реализации Программы развития НГУ. Дисциплина реализуется на физическом факультете Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования Новосибирский национальный исследовательский государственный университет (НГУ) кафедрой химической и биологической физики в качестве дисциплины по выбору. Дисциплина изучается студентами первого курса магистратуры физического факультета в весеннем семестре.

Цель курса – знакомство с базовыми теориями и моделями современной квантовой химии и их реализацией для расчета различных физико-химических свойств соединений.

Дисциплина нацелена на формирование у обучающегося профессиональной компетенции:

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
ПК-1 Способен использовать специализированные знания в области физики при решении поставленных задач в научно-исследовательской деятельности в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.	ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при решении конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования. ПК 1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.	Знать основные приближения, уравнения и основные методы квантовой химии: метод Хартри-Фока, методы учета электронной корреляции, методы и наиболее распространенные функционалы теории функционала плотности. Уметь на основе исходных экспериментальных данных определять наиболее подходящий квантово-химический метод для исследования конкретной системы. Владеть практическими навыками работы в существующих программных пакетах для численного решения уравнений квантовой химии.

Курс рассчитан на один семестр (2-ой). Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, практические занятия, задачи для самостоятельного решения, консультации, самостоятельная работа студента, экзамен.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль: решение задач из задания для самостоятельного решения

Промежуточная аттестация: экзамен

Общая трудоемкость рабочей программы дисциплины составляет **108** академических часов / **3** зачетные единицы.