

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Новосибирский национальный исследовательский государственный университет»  
(Новосибирский государственный университет, НГУ)

**Физический факультет  
Кафедра химической и биологической физики**



академик РАН

УТВЕРЖДАЮ

Декан ФФ

А. Е. Бондарь

« 04 » 2020 г.

**Рабочая программа дисциплины**

**КВАНТОВАЯ ХИМИЯ**

направление подготовки: **03.04.02 Физика, Курс 1, семестр 1**  
направленность (профиль): **Общая и фундаментальная физика**

Форма обучения

**Очная**

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)					Промежуточная аттестация (в часах)			
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	72	32	32		2	2	2			2
Всего 72 часа / 2 зачетных единицы из них: - контактная работа 68 часов - в интерактивных формах 32 часа										
Компетенции ПК-1, ПК-2										

Разработчик:  
к.ф.-м.н., доцент

В.Г. Киселев

Зав. кафедрой ХиБФ ФФ НГУ  
д.ф.-м.н., проф.

С. А. Дзюба

Руководитель программы  
д.ф.-м.н.

Новосибирск, 2020

<b>Содержание</b>	
<b>Аннотация</b> .....	3
1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы. ....	4
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы. ....	5
3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу. ....	5
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий. ....	6
5. Перечень учебной литературы. ....	12
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся. ....	12
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины. ....	13
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине. ....	13
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине. ....	13
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине. ....	14

## 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 осеннем 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 выпускника следующих профессиональных компетенций:

**ПК-1 способность самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего российского и зарубежного опыта**

**ПК-2 способность свободно владеть разделами физики, необходимыми для решения научно-инновационных задач, и применять результаты научных исследований в инновационной деятельности.**

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- **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 (1-ый). Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, практические занятия, 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 **72** академических часа / **2** зачетные единицы.

## 1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Цель учебного курса «Квантовая химия» – обучение слушателей основам базовых теорий и моделей современной квантовой химии, их применению для расчета различных физико-химических свойств веществ, а также получение слушателями практических навыков использования полученных знаний в области химической физики и биофизики.

Профессиональная компетенция ПК-1 - способность самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области физики (*в части задач квантовой химии*) и решать их с помощью современной аппаратуры и информационных технологий с использованием новейшего российского и зарубежного опыта.

Профессиональная компетенция ПК-2 - способность свободно владеть разделами физики (*в части разделов квантовой химии*), необходимыми для решения научно-инновационных задач, и применять результаты научных исследований в инновационной деятельности.

Материал лекционного курса увязывается с передовыми исследованиями всюду, где это допускается уровнем знаний и подготовки студентов. Уделяется особое внимание современным «горячим точкам» в квантовой химии, связанным с темами курса, например, учету дисперсионных взаимодействий в теории функционала плотности, континуальным методам учета влияния растворителя и др. В каждом случае специально отмечаются вопросы, активно обсуждаемые в современной профессиональной научной литературе. В начале каждого очередного занятия проводится проверка усвоения предыдущего материала в интерактивной форме – умение студентов сходу отвечать на вопросы (а также формулировать их) развивает профессиональные навыки, которые будут незаменимы в дальнейшей профессиональной деятельности.

Во время практических занятий значительное внимание также уделяется самостоятельному решению задач студентами. При этом решению задачи предшествует коллективное обсуждение условий задачи и возможных путей решения. Важным элементом работы является индивидуальное общение преподавателя со студентами, при котором у преподавателя есть возможность увидеть пробелы в понимании темы данным студентом и помочь ему в преодолении трудностей. При возникновении трудностей у большей части студентов, задача разбирается у доски с одним из решивших ее студентов. Существенным элементом образовательных технологий является не только умение студента найти решение поставленной задачи, но и донести его до всей аудитории. Важная часть курса – практические занятия, на которые студенты учатся работать с реальными квантово-химическими расчетными пакетами и интерфейсами для визуализации результатов. Помимо общих для всей группы учебных задач, каждый студент получает индивидуальное расчетное задание в соответствии с профилем его/ее научной деятельности. Такая практика способствует уяснению роли и места квантово-химических расчетов в реальной научной работе.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- **Знать:** основные приближения, уравнения и основные методы квантовой химии: метод Хартри-Фока, методы учета электронной корреляции, методы и наиболее распространенные функционалы теории функционала плотности (ПК-1.1);
- **Уметь:** на основе исходных экспериментальных данных определять наиболее подходящий квантово-химический метод для исследования конкретной системы (ПК-1.2);
- **Владеть:** практическими навыками работы в существующих программных пакетах для численного решения уравнений квантовой химии (ПК-2.3);

Курс рассчитан на один семестр (1-ый). Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, практические занятия, задачи для самостоятельного решения, консультации, самостоятельная работа студента, экзамен.

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Квантовая химия» реализуется для обучающихся по направлению подготовки 03.04.02 Физика. Общая и фундаментальная физика. Курс относится к числу дисциплин по выбору, реализуемых на кафедре химической и биологической физики физического факультета Новосибирского Государственного Университета. При изучении курса магистранты должны понимать, что основные законы и методы расчета электронной структуры молекул в значительной мере базируются на законах и принципах общефизических дисциплин, изученных ими ранее. Необходимыми предпосылками для успешного освоения курса являются следующие. В цикле математических дисциплин: знание математического анализа, линейной алгебры, основ функционального анализа и методов математической физики и умение применять эти знания при решении задач. Эти знания необходимы для понимания смысла уравнений квантовой химии, которые требуют решения обыкновенных дифференциальных уравнений, уравнений математической физики и задач на собственные значения. В цикле общефизических дисциплин необходимыми предпосылками являются знание и умение применять основные принципы классической механики, молекулярной физики и в особенности, квантовой механики и статистической физики, поскольку знание этих дисциплин необходимо при изучении теоретических методов, используемых для расчета электронной структуры молекул. Развитие программных комплексов, ориентированных на использование не только специалистами-теоретиками, но и непосредственно экспериментаторами, позволило сделать квантовую химию одним из широко используемых физических методов исследования в химии. Поэтому знание современного состояния квантовой химии, умение ориентироваться в современной квантово-химической литературе и проводить простые расчеты и оценки необходимо не только теоретикам, но и широким специалистам в области физической химии и химической физики. Соответственно, знание основ квантовой химии необходимо при изучении других курсов цикла обучения студентов, специализирующихся в области химической и биологической физики (например, курсов электронной и колебательной спектроскопии, спектроскопии конденсированных сред и др.), и при прохождении научной практики.

## 3. Трудоемкость дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)				
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	72	32	32		2	2	2			2
Всего 72 часа / 2 зачетных единицы из них: - контактная работа 68 часов - в интерактивных формах 32 часа										
Компетенции ПК-1, ПК-2										

Реализация дисциплины предусматривает практическую подготовку при проведении следующих видов занятий, предусматривающих участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, практические занятия, консультации, самостоятельная работа студентов, 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 **72** академических часа / **2** зачетные единицы.

**4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.**

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачётные единицы, 72 академических часа.

№ п/п	Раздел дисциплины	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоёмкость (в часах)				Консультации перед экзаменом (часов)	Промежуточная аттестация (в период сессии) (в часах)	
			Всего	Аудиторные часы		Сам. работа во время занятий (не включая период сессии)			Сам. работа во время промежуточной аттестации
				Лекции	Практические занятия				
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1.	<b>Основные понятия и приближения квантовой химии. Уравнения самосогласованного поля (SCF). Основные приближения, понятие самосогласованного поля (SCF). Вариационный подход и вывод уравнений Хартри-Фока. Теоремы</b>	1-2	8	4	4				

	Купманса и Бриллюэна. Уравнения ограниченного (RHF) и неограниченного метода Хартри-Фока (UHF).								
2	<b>Метод Хартри-Фока-Рутана.</b> Вывод уравнений Хартри-Фока-Рутана. Различные типы базисных функций. Особенности расчетов молекул с тяжелыми атомами; эффективные остоновые потенциалы.	3-4	8	4	4				
3	<b>Методы учета электронной корреляции.</b> Понятие статической и динамической корреляции. Методы учета статической корреляции, многоконфигурационные методы (CASSCF). Методы учета динамической корреляции: теория возмущений, конфигурационное взаимодействие (CI). Метод связанных кластеров (CC).	5	4	2	2				

4.	<p><b>Теория функционала плотности.</b>  Теоремы Хоэнберга-Кона, вспомогательная система невзаимодействующих электронов и вывод уравнений Кона-Шэма.  Приближение локальной плотности (LDA).  Локальные и градиентно-скорректированные (GGA) функционалы плотности.  Гибридные методы.</p>	6-8	8	4	4				
5.	<p><b>Полуэмпирические методы.</b>  Методы полного и частичного пренебрежения дифференциальным перекрыванием: CNDO, INDO.  Методы, основанные на приближении пренебрежения двухатомным дифференциальным перекрыванием: MNDO, AM1 и PM3.</p>	9	8	4	4				
6.	<p><b>Краткое знакомство с методом молекулярной механики.</b>  Основы теории: потенциальная энергия молекулярных</p>	10	4	2	2				



	систем, понятие силового поля. Области применения методов молекулярной механики.								
7.	<b>Учет влияния среды в квантово-химических расчетах.</b> Метод супермолекулы. Рассмотрение среды как диэлектрического континуума: модель Онзагера и модель поляризованного континуума Томаша (PCM).	11-12	8	4	4				
8.	<b>Практическое применение современных методов квантовой химии.</b> Методы оптимизации геометрии молекул. Расчеты поверхностей потенциальной энергии (ППЭ) и свойств, связанных со строением ППЭ: ИК- и КР-спектров, термодинамических характеристик молекул, активационных барьеров химических реакций. Методы расчета магниторезонансных параметров. Расчеты	13-14	8	4	4				

	электронных спектров поглощения и свойств возбужденных состояний.								
9.	<b>Программное обеспечение для расчетов и его возможности.</b> Знакомство с возможностями широко распространенных программных продуктов (Gaussian, ORCA, MOLPRO, ChemCraft, GaussView).	15	10	4	4	2			
10.	Групповая консультация		2					2	
11.	Самостоятельная подготовка обучающегося к экзамену		2				2		
	Экзамен		2						2
<b>Всего</b>			<b>72</b>	<b>32</b>	<b>32</b>	<b>2</b>	<b>2</b>	<b>2</b>	<b>2</b>

### Программа и основное содержание лекций (32 часа)

#### 1. Основные понятия и приближения квантовой химии. Уравнения самосогласованного поля (SCF). (4 часа)

Основные приближения теории: нерелятивистское приближение, адиабатическое приближение, орбитальное приближение. Понятие самосогласованного поля (ССП, SCF). Детерминант Слейтера. Вариационный подход и вывод уравнений Хартри-Фока. Инвариантность оператора Фока относительно линейных преобразований базиса спин-орбиталей и диагонализация матрицы собственных значений. Канонические молекулярные орбитали (МО), виртуальные МО. Физический смысл энергии канонических орбиталей. Теоремы Купманса и Бриллюэна. Молекулы с замкнутыми и открытыми электронными оболочками. Уравнения ограниченного (RHF) и неограниченного метода Хартри-Фока (UHF).

#### 2.. Метод Хартри-Фока-Рутана. Практические способы решения уравнений Хартри-Фока (4 часа)

Представление молекулярных орбиталей в виде линейной комбинации атомных базисных функций (МО ЛКАО). Вывод уравнений Хартри-Фока-Рутана. Типичные базисные наборы: поплловские (n-klmG) и корреляционно-согласованные (cc-pVnZ). Поляризационные и диффузные функции. Библиотеки базисных наборов. Методы расчета молекулярных одно- и двухэлектронных

многоцентровых интегралов. Особенности расчетов молекул с тяжелыми атомами; эффективные потенциалы остова.

### **3. Методы учета электронной корреляции. (2 часа)**

Корреляционная энергия многоэлектронных систем, ее критическое значение для количественных расчетов свойств молекул. Понятие статической и динамической корреляции. Многодетерминантные волновые функции. Методы учета статической корреляции: конфигурационное взаимодействие с варьированием одноэлектронных функций – многоконfigurационные методы (CASSCF). Ранние методы учета динамической корреляции: теория возмущений Меллера-Плессета (MP2-MP4), методы полного (FCI) и ограниченного (CI) конфигурационного взаимодействия. Понятие размерной согласованности методов. Квадратичная модификация метода конфигурационного взаимодействия (QCISD). Метод связанных кластеров (CC) – основной инструмент современных высокоточных расчетов. Наиболее важные практические реализации метода связанных кластеров: неитерационный учет тройных возбуждений (CCSD(T)), учет электронной корреляции в явном виде (F12- и R12-методы), локальные методы (LCCSD(T)). Экстраполяция к бесконечному базисному набору.

### **4. Теория функционала плотности. (4 часа)**

Основы теории, понятие электронной плотности. Подходы, предшествующие современной теории функционала плотности: методы Томаса-Ферми и Томаса-Ферми-Дирака, метод Слейтера (X-alpha), расчет обменной энергии однородного электронного газа, вывод уравнений. Основные теоремы теории функционала плотности (ТФП, DFT). Вспомогательная система невзаимодействующих электронов и вывод уравнений Кона-Шэма. Приближение локальной плотности (LDA). Обменные и корреляционные функционалы. Локальные и градиентно-скорректированные (GGA) функционалы плотности. Принцип адиабатического соединения, гибридные методы. Метод B3LYP. Мета-гибридные и дважды гибридные функционалы. Параметрические функционалы (семейство методов M06). Иерархия современных методов DFT. Применение DFT для расчетов свойств возбужденных состояний: методы TD-DFT. Внутренние недостатки современных методов (самовзаимодействие электронов, неучет дисперсионных взаимодействий) и пути их устранения.

### **5. Полуэмпирические методы. (4 часа)**

Приближение нулевого дифференциального перекрывания. Методы полного и частичного пренебрежения дифференциальным перекрыванием: CNDO, INDO. Методы, основанные на приближении пренебрежения двухатомным дифференциальным перекрыванием: MNDO, AM1 и PM3. Проблема параметризации. Иерархия полуэмпирических методов расчета молекул. Последние модификации полуэмпирических методов – PM6. Место полуэмпирических методов в современной расчетной квантовой химии. Гибридные ONIOM-методы.

### **6. Краткое знакомство с методом молекулярной механики. (2 часа)**

**Основы теории: потенциальная энергия молекулярных систем, понятие силового поля. Методы параметризации на примере метода AMBER и семейства методов MM3-MM5. Области применения методов молекулярной механики.**

### **7. Учет влияния среды в квантово-химических расчетах. (4 часа)**

Метод супермолекулы. «Псевдоконтинуальные» модели: точечных зарядов и точечных диполей. Рассмотрение среды как диэлектрического континуума: модель Онзагера и модель поляризованного континуума Томаши (PCM).

### **8. Практическое применение современных методов квантовой химии. (4 часа)**

Основные пакеты квантово-химических программ, их возможности. Логическая структура типичных неэмпирических (abinitio) и DFT-программ расчета электронной структуры и свойств молекулярных систем. Методы оптимизации геометрии молекул. Расчеты поверхностей потенциальной энергии (ППЭ) и свойств, связанных со строением ППЭ: ИК- и КР-спектров, термодинамических характеристик молекул, активационных барьеров химических реакций. Многоуровневые методы для высокоточной термохимии (семейства G2-G4, W1-W4). Методы расчета магниторезонансных параметров. Расчеты электронных спектров поглощения и свойств возбужденных состояний. Достоверность получаемых результатов, средняя точность расчетов.

#### **9. Программное обеспечение для расчетов и его возможности. (4 часа)**

Знакомство с возможностями широко распространенных программных продуктов (Gaussian, ORCA, MOLPRO, ChemCraft, GaussView).

#### **Программа практических занятий (32 часа)**

1. Одноэлектронное приближение. Уравнения самосогласованного поля (SCF). (4 часа)
2. Практические способы решения уравнений Хартри-Фока. Метод Хартри-Фока-Рутана. (4 часа)
3. Методы учета электронной корреляции. (2 часа)
4. Теория функционала плотности. (4 часа)
5. Полуэмпирические методы. (4 часа)
6. Учет влияния среды в квантово-химических расчетах. (2 часа)
7. Краткое знакомство с методом молекулярной механики. (4 часа)
8. Практическое применение современных методов квантовой химии. (4 часа)
9. Программное обеспечение для расчетов и его возможности. (4 часа)

#### **Самостоятельная работа студентов (4 часа)**

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Подготовка к практическим занятиям.	2 часа
Подготовка к экзамену	2 часа

#### **5. Перечень учебной литературы.**

##### **5.1. Основная литература**

1. Грицан Н.П., Квантовая химия. Учебное пособие. Новосибирск, 2001.

##### **5.2. Дополнительная литература**

2. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. 495 с.

#### **6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.**

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующими учебными пособиями:

1. Грицан Н.П., Квантовая химия. Учебное пособие. Новосибирск, 2001.

## **7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.**

Для освоения дисциплины используются следующие ресурсы:

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.

Интернет-ресурсы:

1. CCL (Computational Chemistry List): <http://www.ccl.net/chemistry/index.shtml>
2. EMSL Basis Set Exchange Library: <https://bse.pnl.gov/bse/portal>
3. Chemcraft – a graphical interface for quantum chemistry computations: <http://www.chemcraftprog.com/>
4. ORCA – a modern electronic structure program package: <http://www.thch.uni-bonn.de/tc/orca/>

### **7.1 Современные профессиональные базы данных**

Не используются.

### **7.2. Информационные справочные системы**

Не используются.

## **8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.**

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

## **9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.**

Для реализации дисциплины Квантовая химия используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной и итоговой аттестации;

2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся;

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется со-

гласно «Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете».

## **10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.**

### **10.1 Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине**

#### ***Текущий контроль***

Текущий контроль осуществляется по оценочной системе в виде теоретического опроса (контрольных вопросов на знание материала предыдущей лекции), заданий для самостоятельного решения. Оценка знаний, умений, навыков и освоения компетенций обучающимися в рамках текущего контроля может проводиться согласно шкале и критериям, представленным ниже.

#### ***Промежуточная аттестация***

Освоение компетенций оценивается согласно шкале оценки уровня сформированности компетенции. Положительная оценка по дисциплине выставляется в том случае, если заявленные компетенции ПК-1 и ПК-2 сформированы не ниже порогового уровня в части, относящейся к формированию способности использовать специализированные знания в области Квантовой химии в профессиональной деятельности.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит на экзамене. Экзамен проводится в конце семестра в экзаменационную сессию по билетам в устной форме. Билет состоит из двух вопросов и задачи. Вопросы билета подбираются таким образом, чтобы проверить уровень сформированности компетенций ПК-1 и ПК-2.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит на экзамене с учётом результатов текущего контроля успеваемости. Экзамен проводится в конце семестра в экзаменационную сессию, по билетам, в устной форме. Билет состоит из двух вопросов.

Уровень сформированности компетенций оценивается преподавателем по пятибалльной шкале с учётом критериев (таблица) по результатам ответов на вопросы билета и на дополнительные уточняющие вопросы.

Для получения оценки «отлично» (продвинутый уровень усвоения компетенций) необходимо развёрнуто ответить на два вопроса из билета, правильно ответить на дополнительные вопросы.

Для получения оценки «хорошо» (базовый уровень усвоения компетенций) нужно ответить на два вопроса билета и дополнительные вопросы. Допускается несколько несущественных ошибок при ответе на вопросы билета и дополнительные вопросы.

Для получения на устном экзамене оценки «удовлетворительно» (пороговый уровень усвоения компетенций) необходимо ответить хотя бы на один вопрос в билете.

Оценка «неудовлетворительно» - уровень усвоения компетенций не сформирован.

Обучающийся, имеющий неудовлетворительные результаты при прохождении промежуточной аттестации, обязан ликвидировать академическую задолженность по дисциплине, согласно установленным факультетом срокам прохождения повторной промежуточной аттестации. Сроки проведения повторной промежуточной аттестации согласовываются с преподавателем и утверждаются распоряжением декана.

Вывод об уровне сформированности компетенций принимается преподавателем. Каждый вопрос билета оценивается от 0 до 5 баллов. Положительная оценка ставится, когда все компетенции освоены не ниже порогового уровня. Оценки «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» означают успешное прохождение промежуточной аттестации.

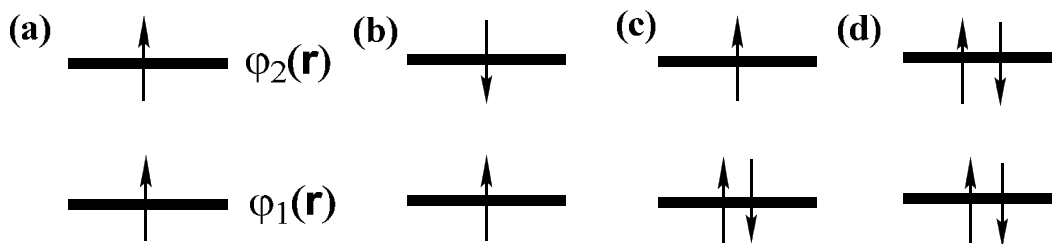
**Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Квантовая химия».**

Критерии оценивания результатов обучения	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Уровень освоения компетенции			
		Не сформирован (0 баллов)	Пороговый уровень (3 балла)	Базовый уровень (4 балла)	Продвинутый уровень (5 баллов)
1	2	3	4	5	6
Полнота знаний	ПК 1.1	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имеют место грубые ошибки.	Минимально допустимый уровень знаний. Допускается значительное количество негрубых ошибок.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Допускается несколько негрубых/несущественных ошибок. Не отвечает на дополнительные вопросы.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Свободно и аргументированно отвечает на дополнительные вопросы.
Наличие умений	ПК 1.2	Отсутствие минимальных умений. Не умеет решать стандартные задачи. Имеют место грубые ошибки.	Продемонстрированы частично основные умения. Решены типовые задачи. Допущены негрубые ошибки.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками или с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания в полном объеме без недочетов и ошибок.
Наличие навыков (владение опытом)	ПК 2.3	Отсутствие владения материалом по темам/разделам дисциплины. Нет навыков в решении стандартных задач. Наличие грубых ошибок.	Имеется минимальный набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач без ошибок и недочетов. Продемонстрированы знания по решению нестандартных задач.

**Типовые контрольные задания и материалы, необходимые для оценки результатов обучения**

**Примеры некоторых типовых заданий для самостоятельного решения для проведения текущего контроля успеваемости обучающихся.**

1. Для следующих формальных электронных конфигураций (b-d) запишите выражения для хартри-фоковской энергии:



- Какова размерность матрицы Фока, которая будет использована в расчете типичных молекул (например, азотистых оснований ДНК) методом Хартри-Фока-Рутана с базисным набором 6 31+G(d)?
- Сколько примитивных гауссианов содержит этот базисный набор для данной молекулы (принять, что в базисе используется 6 d-функций)?
- Каков вид невозмущенного гамильтониана в рамках теории Меллера-Плессета?
- Почему обсуждение теории возмущений Меллера-Плессета начинают со второго порядка (MP2)? Что представляет собой поправка первого порядка?
- Что такое размерная согласованность методов? Являются ли методы truncated CI размерно согласованными?
- В чем главные преимущества методов CC по сравнению с аналогами truncated CI?
- В чем состоит суть подхода Кона-Шэма? Чему соответствуют орбитали Кона-Шэма?
- В чем суть методов LDA, GGA, что такое гибридные функционалы DFT?

### Вопросы на экзамен

*На проверку сформированности компетенции ПК-1:*

- Основные приближения теории Хартри-Фока. Уравнения Хартри-Фока.
- Свойства канонических орбиталей Хартри-Фока. Теоремы Коопманса и Бриллюэна.
- Метод Хартри-Фока-Рутана для молекул с замкнутой электронной оболочкой
- Базисные функции, используемые в квантовохимических расчетах. Особенности расчетов молекул с тяжелыми атомами: псевдопотенциалы.
- Теория возмущения Меллера-Плессета (Moller-Plesset, MP).
- Метод связанных кластеров (coupled cluster, CC).
- Метод конфигурационного взаимодействия (configuration interaction, CI), его квадратичная модификация (QCISD).
- Полуэмпирика: метод MNDO и его модификации (AM1 и PM3).

*На проверку сформированности компетенции ПК-2:*

- Основные теоремы теории функционала плотности.
- Метод Кона-Шэма.
- Приближение локальной (спиновой) плотности (LDA, LSDA).
- Обобщенное градиентное приближение в теории функционала плотности (GGA).
- Поверхности потенциальной энергии: стационарные точки, оптимизация геометрии. Квантово-химические расчеты ИК- и КР-спектров молекул.
- Расчет спектров электронного поглощения.
- Расчеты термодинамики и активационных барьеров реакций в квантовой химии.
- Подходы к учету влияния растворителя: континуальные и дискретные модели. Метод поляризованного континуума (PCM).
- Понятие силового поля в методах молекулярной механики.
- Понятие потенциальной энергии молекулярной системы в методах молекулярной механики.



## Пример экзаменационного билета

<p>МИНОБРНАУКИ РОССИИ</p> <p>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет» (Новосибирский государственный университет, НГУ)</p> <p>Физический факультет</p>
<p><b>ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № _____</b></p> <p>1. Основные приближения теории Хартри-Фока. Уравнения Хартри-Фока (на компетенцию ПК-1).</p> <p>2. Подходы к учету влияния растворителя: континуальные и дискретные модели. Метод поляризованного континуума (PCM) (на компетенцию ПК-2).</p> <p>Составитель _____ /Киселев В.Г./ (подпись)</p> <p>« ____ » _____ 20 ____ г.</p>

Оценочные материалы по промежуточной аттестации, предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям СУОС, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.

**Лист актуализации фонда оценочных средств  
по дисциплине «Квантовая химия»  
по направлению подготовки 03.04.02 Физика  
Профиль «Общая и фундаментальная физика»**

№	Характеристика внесенных изменений (с указанием пунктов документа)	Дата и № протокола Учёного совета ФФ НГУ	Подпись ответственного