

**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.