

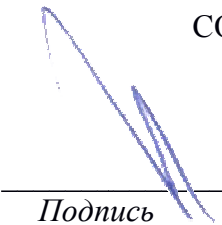
Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский
государственный университет» (Новосибирский государственный университет, НГУ)

Факультет естественных наук

СОГЛАСОВАНО

Декан ФЕН

Резников В. А.


Подпись

5 октября 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

СТРОЕНИЕ НЕОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

направление подготовки: 04.03.01 Химия

направленность (профиль): Химия

Форма обучения: очная

Разработчик:

к.ф.-м.н., Мирзаева И.В.

Зав. кафедрой

Чл.-к. РАН, д.х.н., проф. Федин В.П.

Руководитель программы:

д.х.н., доц. Емельянов В.А.

Новосибирск, 2020

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.....	3
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы	4
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 обучающегося	5
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий.....	5
5. Перечень учебной литературы	7
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся..	8
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины	8
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	9
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	9
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.....	9

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

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
<p>Б-ОПК-1. Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений</p>	<p>Б-ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов</p>	<p><i>-понимает</i> фундаментальные физические основы взаимосвязи структуры и свойств неорганических веществ и материалов <i>-умеет</i> сопоставить результаты теоретических квантовохимических расчётов с доступными экспериментальными и литературными данными</p>
<p>Б-ОПК-3. Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники</p>	<p>Б-ОПК-3.1. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности</p> <p>Б-ОПК-3.2.Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности</p>	<p><i>-умеет</i> выполнять простые квантовохимические расчёты <i>-знает</i>, какие квантовохимические методы можно использовать для предсказания тех или иных свойств неорганических веществ <i>-имеет</i> опыт работы в распространённых квантовохимических программных пакетах (Gaussian, ADF, DIRAC, Quantum-Espresso)</p>
<p>Б-ОПК-5.Способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности</p>	<p>Б-ОПК-5.1.Использует современные IT-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля</p> <p>Б-ОПК-5.2. Соблюдает нормы информационной безопасности в профессиональной</p>	<p><i>-использует</i> поиск в сети Интернет, на специализированных сайтах и в специальных базах данных для решения поставленных задач <i>-умеет</i> работать на современных вычислительных кластерах с помощью</p>

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
	деятельности	удаленного доступа по протоколу ssh - <i>знает</i> основные команды оболочки bash для навигации по файловой системе и работы с текстовыми файлами - <i>умеет</i> работать на удалённом вычислительном кластере с соблюдением норм информационной безопасности
Б-ОПК-6. Способен представлять результаты своей работы в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе	Б-ОПК-6.1. Представляет результаты работы в виде отчета по стандартной форме на русском языке	- <i>имеет</i> опыт представления результатов квантовохимических расчётов в виде отчета по стандартной форме

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплины (практики), изучение которых необходимо для освоения дисциплины «Строение неорганических веществ»:

- математический анализ;
- высшая алгебра;
- физика (электромагнитное излучение, кулоновское взаимодействие, квантовая механика, статистическая физика);
- неорганическая химия (строение и свойства атомов, периодический закон, строение молекул);
- физическая химия (природа химической связи в молекулах и кристаллах);
- строение вещества (электронные конфигурации атомов и ионов, гибридизация, электронные переходы).

Дисциплины (практики), для изучения которых необходимо для освоения дисциплины «Строение неорганических веществ»:

- «Теоретические и экспериментальные методы исследования в неорганической химии»;
- «Функциональные материалы»;
- «Избранные главы металлоорганической химии»;
- научно-исследовательская практика.

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 обучающегося

Трудоемкость дисциплины – 5 з.е. (180 ч)

Форма промежуточной аттестации: 7 семестр – экзамен

№	Вид деятельности	Семестр
		7
1	Лекции, ч	36
2	Практические занятия, ч	54
3	Лабораторные занятия, ч	
4	Занятия в контактной форме, ч , из них	96
5	из них аудиторных занятий, ч	90
6	в электронной форме, ч	
7	консультаций, час.	4
8	промежуточная аттестация, ч	2
9	Самостоятельная работа, час.	84
10	Всего, ч	180

Реализация дисциплины включена в практическую подготовку в ИНХ СО РАН при проведении следующих видов занятий, часть из которых предусматривает участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью:

- лекции;
- практические занятия.

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

7 семестр
Лекции (36 ч)

Наименование темы и их содержание	Объем, час
Раздел 1 Структура небольших молекул. Расчеты ab initio.	
1. Введение. Историческая справка. Решение уравнения Шредингера для атома водорода.	4
2. Многоэлектронные системы. Приближение Борна-Оппенгеймера. Метод Хартри. Метод Хартри-Фока, ограниченный и неограниченный.	2
3. Атомные и молекулярные орбитали. Метод МО ЛКАО. Базисы для квантовохимических расчетов.	2
4. Электронная корреляция. Метод конфигурационного взаимодействия. Методы MCSCF, CASSCF.	2
5. Учет электронной корреляции по теории возмущений, теория Меллера-Плессета.	2
6. Метод связанных кластеров. Комбинированные многоуровневые методы для высокоточного расчета энергии.	2
Раздел 2 Структура больших молекулярных систем. Теория функционала	

плотности.	
1. Статистический подход для описания многоэлектронных систем. Модель Томаса-Ферми	2
2. Теоремы Хоэнберга-Кона. Основные идеи теории функционала плотности. Матрицы плотности. Естественные орбитали.	2
3. Принципы поиска функционалов плотности. Реакционная способность неорганических соединений. «Мягкие» и «жесткие» основания и кислоты. Функции Фукуи.	2
4. Иерархия функционалов плотности. Дополнительные эмпирические поправки для учета дисперсионного взаимодействия.	4
Раздел 3 Строение соединений тяжелых элементов. Релятивистская квантовая химия.	
1. Тонкая структура спектральных линий. Необходимость учета релятивистских эффектов. Четырехкомпонентная волновая функция. Уравнение Дирака. Взаимодействие между электронами в релятивистском случае.	2
2. Преобразование Фолди-Вутуйсена. Точные и приближенные релятивистские двухкомпонентные методы расчёта строения неорганических соединений.	2
3. Приближение замороженных орбиталей. Релятивистские основные потенциалы. Проявление релятивистских эффектов в строении и свойствах соединений тяжелых элементов.	2
Раздел 4. Строение кристаллов и низкоразмерных материалов. Периодические расчеты.	
1. Одномерные, двумерные и трехмерные периодические системы. Электрон в периодическом потенциале. Элементы зонной теории.	2
2. Обратное пространство. Плотность состояний. Базисы в виде плоских волн. Псевдопотенциалы для периодических расчетов.	2
3. Колебания в твердом теле. Фононы.	2

Практические занятия (54 ч)

Содержание практического занятия	Объем, час
Работа на современных вычислительных кластерах. ОС Linux. Соединение с сервером по протоколу ssh. Работа в командной строке.	3
Навигация по файловой системе в ОС Linux. Чтение и редактирование текстовых файлов. Написание простых сценариев на bash.	3
Программный комплекс Gaussian09. Расчет электронного строения атомов и простых двухатомных молекул.	3
Программа GaussView5. Построение молекул. Утилиты formchk и cubegen. Визуализация атомных и молекулярных орбиталей.	3
Внутренние координаты. Оптимизация геометрии молекулы.	3
Сравнение ресурсоемкости различных пост-Хартри-Фок методов на примерах простых систем.	6
Программный комплекс ADF. Запуск задачи, ключевые отличия от Gaussian09.	3
Графический пользовательский интерфейс ADFGUI: основные компоненты, построение молекул, создание расчетной задачи, просмотр результатов расчета.	3
Визуализация электростатического потенциала. Предсказание реакционной способности молекул. Расчет и визуализация функций	6

Фукуи.	
Оптимизация геометрии слабосвязанных димеров с различными функционалами. Подбор параметров функционалов.	3
Знакомство с программой DIRAC. Визуализация различных компонентов релятивистской волновой функции.	3
Релятивистские расчеты в ADF. Визуализация различных компонентов релятивистской волновой функции.	3
Расчеты с основными потенциалами в Gaussian09. Расчеты с замороженными внутренними орбиталями в ADF.	3
Модуль для периодических расчетов BAND: создание задачи и просмотр результатов. Расчет зонной структуры.	3
Программный пакет для периодических расчетов Quantum Espresso: назначение различных модулей, создание и запуск задачи, визуализация результатов, создание задачи с помощью ADFGUI	3
Оптимизация геометрии в Quantum Espresso. Расчет зонной структуры. Расчет колебательных частот.	3

Самостоятельная работа студентов (84 ч)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Самостоятельная работа во время занятий, из них:	60
закрепление, обобщение и повторение пройденного учебного материала	10
уточнение и дополнение сведений и знаний, полученных на лекциях	10
выполнение домашнего задания	20
подготовка к прохождению текущего контроля успеваемости (самостоятельные и контрольные работы)	16
изучение теоретического материала, не освещаемого на лекциях	4
Самостоятельная работа во время промежуточной аттестации из них:	24
подготовка к экзамену	24

5. Перечень учебной литературы

1. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела / **В.Г. Цирельсон** ; Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010.-495 с. ISBN 978-5-9963-0080-8
2. Квантовая химия Ч.1: Основы теории./ **Н. П. Грицан** ; М-во образования Рос. Федерации, Новосиб. гос. ун-т, Физ. фак., Каф. хим. и биол. Физики-Новосибирск : Редакционно-издательский центр НГУ, 2001.-144 с.
3. Релятивистская теория электронного строения молекул / **А.В. Зайцевский** ; М.: МГУ, 2005. (или со страницы автора)
4. Введение в физику твердого тела / **Ч. Киттель** ; пер. с англ. под общ. ред. А.А. Гусева.- Изд. 2-е, стер.-Москва : Альянс, 2013.-791 с. Перепечатка с издания 1978 г.

6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся

5. Физика твердого тела : [в 2 т.] / **Н. Ашкрофт, Н. Мермин** ; под ред. М.И. Каганова Москва : Мир, 1979. Пер. изд.: Solid state Physics / Neil W. Ashcroft, N. David Mermin. - New York [et al.]: Holt, Rinehart and Winston, 1976.
6. Теоретическая физика Т.3: Квантовая механика. Нерелятивистская теория. / **Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц**.-Москва : Наука, 1989.-767 с. ISBN 5-02-013850-9.-ISBN 5-02-014421-5
7. Density-Functional theory of Atoms and Molecules / **Robert G. Parr and Weitao Yang**.- New York : Oxford University Press ; Oxford : Clarendon Press, 1989, 333 p. ISBN 0-19-509276-7
8. Атомная физика : освоение через задачи / **Д. Будкер, Д. Кимбелл, Д. ДеМилль** ; пер. с англ. В.С. Запасского ; под ред. Е.Б. Александрова.-Москва : Физматлит, 2009.-400 с. Пер. изд.: Atomic physics: An Exploration Through Problems and Solutions / Dmitry Budker, Derek F. Kimball, David P. DeMille. - Oxford: Oxford Univ. Press, 2003.
9. Симметрия молекул и спектроскопия / **Ф. Банкер, П. Йенсен** ; пер с англ. Ю.Н. Панченко [и др.] ; под ред. Н.Ф. Степанова, 2-е перераб. Изд. Москва : Мир : Научный мир, 2004.-763 с. Пер. изд.: Molecular Symmetry and Spectroscopy / Philip R. Bunker and Per Jensen. - 2nd ed. - Ottawa: NRC Research Press, 1998
10. Атомы в молекулах: Квантовая теория / **Р. Бейдер** ; Пер. с англ. Е.С.Апостоловой и др. / Под ред. М.Ю. Антипина, В.Г. Цирельсона - Atoms in Molecules a quantum Theory - М. : Мир, 2001.-532 с. ISBN 5-03-003363-7

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

7.1 Ресурсы сети Интернет

Освоение дисциплины используются следующие ресурсы:

- Перечень ключевых слов (с примерами) для программы Gaussian:
- Руководство пользователя для ADF2017:
- Руководство пользователя для BAND2017:
- Руководство пользователя для Dirac15:
- Документация к программному комплексу Quantum-Espresso:
- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.

Взаимодействие обучающегося с преподавателем (синхронное и (или) асинхронное) осуществляется через электронную почту,

7.2 Современные профессиональные базы данных:

- Реферативно-поисковая база данных Reaxys(Elsevier)
- Реферативно-библиографическая база данных Scopus (Elsevier)
- Реферативно-библиографическая база данных Scifinder (ChemicalAbstractsService)
- Библиометрическаябазаданных Web of Science Core Collection (Thomson Reuters Scientific LLC.)
- База данных полнотекстовых научных журналов JSTOR.
- Электронные ресурсы российской научной библиотеки eLibrary.ru
- Электронные ресурсы издательства AmericanChemicalSociety (ACS)
- Электронные ресурсы FreedomCollection издательства Elsevier
- Электронныересурсыиздательства The Royal Society of Chemistry (RSC)

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

8.1 Перечень программного обеспечения

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

Для проведения практических занятий используется ssh-клиент и графическая среда X Window System (бесплатная версия программы MobaXterm либо Cygwin/X).

Для выполнения домашних заданий обучающимся необходимо установить на своих домашних компьютерах ssh-клиент и графическая среда X Window System (бесплатная версия программы MobaXterm либо Cygwin/X либо другие). Обучающимся предоставляются логин и пароль для удаленного доступа с помощью протокола ssh к вычислительному кластеру Института неорганической химии СО РАН, на котором установлено все необходимое программное обеспечение для выполнения квантовохимических расчетов (ADF, BAND, Gaussuan09, Dirac, Quantum-Espresso).

8.2 Информационные справочные системы

Не используются.

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

Для реализации дисциплины *Строение неорганических веществ* используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения групповых и индивидуальных консультаций, текущей и промежуточной аттестации;
2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся;
3. Помещения для хранения и профилактического обслуживания учебного оборудования.

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

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 согласно «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

Перечень результатов обучения по дисциплине *Строение неорганических веществ* и индикаторов их достижения представлен в разделе 1.

10.1 Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Текущий контроль успеваемости:

При прохождении курса *Строение неорганических веществ* студенты значительную часть времени должны посвящать самостоятельной работе дома: выполнению домашних

заданий и освоению навыков удаленной работы на вычислительном кластере Института неорганической химии СО РАН. Студентам будет предоставлен доступ к презентациям лекций и семинаров, а также файлам задач, выполненных на семинарах вместе с преподавателем.

Домашние задания должны быть оформлены в виде презентации в формате .ppt, .odp или .pdf и отправлены преподавателю по электронной почте. Если какая-то часть домашнего задания выполнена неправильно или не полностью, преподаватель сообщает об этом студенту, чтобы студент прислал исправленный вариант. Полностью правильно выполненное домашнее задание считается сданным. К экзамену допускаются студенты, сдавшие все домашние задания. Допуск к экзамену автоматически означает, что студент заслуживает оценки «удовлетворительно». По результатам экзамена оценка может быть повышена.

Промежуточная аттестация:

Экзамен проводится в классической устной форме. На экзамене при подготовке ответа на билет разрешается пользоваться литературой и интернетом. Для получения оценки «отлично» необходимо рассказать основную суть предложенной в билете темы из теоретической части курса, а также правильно ответить на дополнительные вопросы технического характера, касающийся процесса работы на вычислительном кластере и особенностей изучаемых квантовохимических программных пакетов. Если один из этих пунктов не будет выполнен, студент получит оценку «хорошо». При ответе на билет и дополнительные вопросы студент должен продемонстрировать общее понимание темы и знание специальной терминологии.

Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине История

Таблица 10.1

Код компетенции	Индикатор	Результат обучения по дисциплине	Оценочное средство
Б-ОПК-1.	Б-ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	<i>-понимает</i> фундаментальные физические основы взаимосвязи структуры и свойств неорганических веществ и материалов <i>-умеет</i> сопоставить результаты теоретических квантовохимических расчётов с доступными экспериментальными и литературными данными	Домашние работы Опросы на практических (семинарских) занятиях Экзамен
Б-ОПК-3.	Б-ОПК-3.1. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	<i>-умеет</i> выполнять простые квантовохимические расчёты <i>-знает</i> , какие квантовохимические методы можно использовать для предсказания тех или иных свойств	Домашние работы Опросы на практических (семинарских) занятиях

		неорганических веществ	
	Б-ОПК-3.2. Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	<i>-имеет</i> опыт работы в распространённых квантовохимических программных пакетах (Gaussian, ADF, DIRAC, Quantum-Espresso)	Домашние работы Опросы на практических (семинарских) занятиях
Б-ОПК-5.	Б-ОПК-5.1. Использует современные IT-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля	<i>-использует</i> поиск в сети Интернет, на специализированных сайтах и в специальных базах данных для решения поставленных задач <i>-умеет</i> работать на современных вычислительных кластерах с помощью удаленного доступа по протоколу ssh <i>-знает</i> основные команды оболочки bash для навигации по файловой системе и работы с текстовыми файлами	Домашние работы Опросы на практических (семинарских) занятиях Экзамен
	Б-ОПК-5.2. Соблюдает нормы информационной безопасности в профессиональной деятельности	<i>-умеет</i> работать на удалённом вычислительном кластере с соблюдением норм информационной безопасности	Домашние работы Опросы на практических (семинарских) занятиях
Б-ОПК-6.	Б-ОПК-6.1. Представляет результаты работы в виде отчета по стандартной форме на русском языке	<i>-имеет</i> опыт представления результатов квантовохимических расчётов в виде отчета по стандартной форме	Домашние работы

Таблица 10.2

Критерии оценивания результатов обучения	Шкала оценивания
<p><u>Работа на занятиях</u> – активное участие в коллективных обсуждениях в ходе практического (семинарского) занятия.</p> <p><u>Домашние работы :</u> – правильно выполнено более 80% домашних заданий – корректное и полное представление информации в отчёте о выполненных квантовохимических расчётах – своевременное исправление недоработок, указанных преподавателем</p> <p><u>Экзамен:</u></p>	<i>Отлично</i>

<p>– точность и корректность применения терминов и понятий из области квантовой химии и строения вещества, – полнота понимания и изложения физических и математических основ вопроса, – осмысленность, структурированность, логичность изложения материала, – наличие полных корректных ответов на дополнительные вопросы. При изложении ответа на вопрос(ы) экзаменационного билета обучающийся может допустить непринципиальные неточности.</p>	
<p><u>Работа на занятиях</u> – участие в коллективных обсуждениях в ходе практического (семинарского) занятия. <u>Домашние работы :</u> – правильно выполнено более 80% домашних заданий – корректное и полное представление информации в отчёте о выполненных квантовохимических расчётах – своевременное исправление недоработок, указанных преподавателем <u>Экзамен:</u> – корректность применения терминов и понятий из области квантовой химии и строения вещества, – принципиальное понимание и осмысленность изложения физических и математических основ вопроса, – отсутствие логики и структурированности изложения материала – наличие полных и корректных ответов на <50% дополнительных вопросов. При изложении ответа на вопрос(ы) экзаменационного билета обучающийся может допустить непринципиальные неточности.</p>	<i>Хорошо</i>
<p><u>Работа на занятиях</u> – участие в коллективных обсуждениях в ходе практического (семинарского) занятия. <u>Домашние работы :</u> – правильно выполнено более 80% домашних заданий – корректное и полное представление информации в отчёте о выполненных квантовохимических расчётах – своевременное исправление недоработок, указанных преподавателем <u>Экзамен:</u> – непонимание и неполное изложение физических и математических основ вопроса, – наличие неполных и/или содержащих существенные ошибки ответов на дополнительные вопросы.</p>	<i>Удовлетворительно</i>
<p><u>Работа на занятиях</u> – неучастие в коллективных обсуждениях в ходе практического (семинарского) занятия. <u>Домашние работы :</u> – правильно выполнено менее 80% домашних заданий – неполное представление информации в отчёте о выполненных квантовохимических расчётах</p>	<i>Неудовлетворительно</i>

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

Оценочные материалы по промежуточной аттестации (приложение 2), предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям ФГОС, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.

Примеры домашних заданий:

1. Рассчитать потенциал ионизации и сродство к электрону для атома Na методами HF/STO-3G, HF/3-21G, HF/6-21G, HF/6-31G*, HF/6-311+G* и MP2/STO-3G, MP2/3-21G, MP2/6-21G, MP2/6-31G*, HF/6-311+G*. Сравнить с литературными данными. Построить зависимость результата и времени расчета от величины базиса.

2. Выполнить оптимизацию геометрии молекулы CO методом PBE/TZ2P. Построить схемы одноэлектронных уровней молекулы CO и составляющих ее атомов C и O. Нарисовать, как выглядят пять высших занятых и три низшие свободные молекулярные орбитали в молекуле CO. Рассчитать энергию связи в молекуле CO методами HF/TZ2P, VWN/TZ2P, BLYP/TZ2P, B3LYP/TZ2P. Рассчитать соответствующие поправки на энергию нулевых колебаний.

3. В ряду Cu → Ag → Au рассчитать потенциалы ионизации с различным уровнем учета релятивистских эффектов: без релятивистских поправок, ZORA Scalar, ZORA Spin-Orbit, X2C. Использовать методы HF/TZ2P, PBE/TZ2P и PBE0/TZ2P. Построить схемы одноэлектронных уровней. Сравнить результаты с известными литературными данными.

Примеры экзаменационных билетов:

1. Электронная корреляция, статическая и динамическая. Метод конфигурационного взаимодействия.

2. Эмпирические и неэмпирические функционалы в теории функционала плотности. Функционал Дирака. Функционал Слэйтера.

3. Уравнение Дирака для релятивистского электрона. Четырёхкомпонентная волновая функция.

4. Приближения сильной и слабой связи для электронов в кристалле.

Примеры дополнительных вопросов на экзамене:

1. Какой из базисов содержит больше базисных функций для атома кислорода: STO-3G, def2-svp или aug-cc-pvTZ?

2. Чем принципиально отличаются базисные наборы, используемые в программе Gaussian, от базисных наборов, используемых в программе ADF?

3. Как в результатах расчётов методом CCSD(T) в программе Gaussian найти полную энергию системы и энергию электронной корреляции?

