

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Курганский государственный университет»
(КГУ)

Кафедра «Физика»



УТВЕРЖДАЮ

Первый проректор

(подпись)

Цероич

(подпись, Ф.И.О.)

2019 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ
ДИСЦИПЛИНЫ**

Квантовая химия

образовательной программы высшего образования –
программы специалитета

04.05.01 – Фундаментальная и прикладная химия.

Формы обучения: очная

Курган 2019

Рабочая программа дисциплины «Квантовая химия» составлена в соответствии с учебным планом по программе специалиста – Фундаментальная и прикладная химия (аналитическая химия), утвержденным 29.08.2019 г.
Рабочая программа дисциплины одобрена на заседании кафедры «Физика» 31.08.2019 г., протокол №1.

Рабочую программу составил
профессор кафедры физики



Б.С. Воронцов

Согласовано:

Заведующий кафедрой
«Физика»



В.И. Бочегов

Заведующий кафедрой
«Физическая и прикладная химия»



Л.В. Мосталыгина

Специалист по учебно-методической
работе учебно-методического отдела



Г.В. Казанкова

Начальник Управления
образовательной деятельности



С.Н. Синецын

1. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Всего: 3 зачетных единицы трудоемкости (108 академических часов).

Вид учебной работы	На всю дисциплину	семестр
Аудиторные занятия (контактная работа с преподавателем), всего часов	42	42
в том числе:		
Лекции	8	8
Лабораторные работы	34	34
Самостоятельная работа, всего часов	66	66
в том числе:		
Подготовка к зачету	18	18
Другие виды самостоятельной работы	48	48
Вид промежуточной аттестации:	Зачет	Зачет
Общая трудоемкость дисциплины и трудоемкость по семестрам, часов	108	108

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Дисциплина «квантовая химия» входит в базовую часть программы (блок 1).

Опираясь на законы квантовой механики, квантовая химия позволяет рассчитать ряд физико-химических свойства вещества:

- геометрические параметры молекул (длины связей и углы между связями)
- электронные характеристики молекул (распределение электронной плотности и ее отнесение к атомам и связям, дипольные моменты молекул, потенциалы ионизации, центры нуклеофильной и электрофильной атаки и др.)
- спектральные характеристики молекулярных систем для различных областей спектра: УФ, оптической, ИК
- энергетические и термодинамические характеристики веществ и реакций.

Изучение курса квантовой химии направлено на определение областей ее наиболее эффективного применения. В частности, это относится к описанию быстропотекающих процессов, процессов на межфазных границах, выяснению механизмов реакций.

Освоение обучающимися дисциплины «квантовая химия» опирается на знания, умения, навыки и компетенции, приобретенные в результате освоения предшествующих дисциплин:

- Математика;
- Физика;
- Информатика;
- Физическая химия;
- Органическая химия;
- Английский язык

Результаты обучения по дисциплине необходимы для успешного освоения следующих дисциплин:

- строение вещества
- Высокомолекулярные соединения;
- Коллоидная химия;
- Химическая технология.

3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

Целью освоения дисциплины квантовая химия является

Умение специалиста рассчитывать и объяснять на основе представлений и методов квантовой механики вопросы строения и реакционной способности химических соединений, специфики химических связей

Задачами освоения дисциплины квантовая химия являются

Формирование у студентов понимание языка квантовой химии и ее специфической терминологии, в том числе и иностранной; изучение теоретических основ квантовой химии; овладение студентами навыков работы с современными расчетными программами квантовой химии, умение правильно интерпретировать результаты расчетов; ознакомить студентов с методиками расчета: структурных параметров молекул (равновесных значений углов и длин связей), электронных параметров молекул (зарядов на атомах, дипольных моментов, потенциалов ионизации и др.), энергетических и термодинамических параметров веществ и реакций и др.), спектральных параметров (оптических, УФ и ИК спектров).

Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины:

- способность анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и теоретических работ химической направленности (ОПК-1);
- способность применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств вещества и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения (ОПК-3);
- способность планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач (ОПК-4);
- способность использовать информационные базы данных и адаптировать программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности (ОПК-5);
- способность представлять результаты профессиональной деятельности в устной и письменной форме с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе (ОПК-6);

В результате изучения дисциплины обучающийся должен:

- знать Основные понятия квантовой химии (для ОПК-3);
- знать основные приближения, используемые при расчетах электронных характеристик молекулярных систем и их свойств (для ОПК-4)
- уметь систематизировать, интерпретировать результаты квантовохимических расчетов (для ОПК-1);
- Уметь составлять отчеты по результатам выполненных лабораторных работ (для ОПК-6);
- владеть навыками квантовохимических расчетов с использованием современных квантовохимических программ (для ОПК-3),
- владеть - навыками работы с информационными базами данных квантовой химии адаптации ее программных продуктов для решения задач профессиональной деятельности (для ОПК-5);

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Учебно-тематический план

Рубеж	Номер раздела, темы	Наименование раздела, темы	Количество часов контактной работы с преподавателем	
			Лекции	Лабораторные работы
7 семестр				
Рубеж 1	1	Методы квантовой химии	2	6
	2	Стандартные неэмпирические и полупэмпирические расчеты	2	8
		<i>Рубежный контроль №1</i>	-	-
Рубеж 2	3	Расширенные методы расчета	2	8
	4	Спектральные, термодинамические, реакционные свойства молекул	2	12
		<i>Рубежный контроль №2</i>	-	-

4.2. Содержание лекционных занятий

Тема 1. Методы квантовой химии

Модель молекулы, описание ее геометрического строения. Уравнение Шредингера для молекулы. Основные приближения в решении уравнения Шредингера: приближение Борна Оппенгеймера, метод самосогласованного поля Хартри, метод Хартри-Фока. Метод молекулярных орбиталей в приближении линейной комбинации атомных орбиталей (метод МОЛКАО).

Тема 2. Стандартные неэмпирические и полуэмпирические расчеты
 Аналитическое описание атомных орбиталей, базисы атомных орбиталей для расчетов в приближении МОЛКАО. Процедура и критерии само согласования. Ограниченный и неограниченный методы хартри – Фока. Параметризация полуэмпирических методов.

Тема 3. Расширенные методы расчета.

Энергия корреляции и методы ее приближенной оценки. Методы конфигурационного взаимодействия, метод теории возмущений, метод функционала электронной плотности.

Поверхность потенциальной энергии (ППЭ) и ее критические точки. Процедура оптимизации ее методы и критерии.

4. Спектральные, термодинамические, реакционные свойства молекул

Силловые постоянные и ИК-спектры молекул. Термодинамические свойства молекулярных систем. Электронные спектры и их интерпретация. Центры и энергия протонирования, заряды на атомах, расчет электростатического потенциала.

4.3. Лабораторные занятия

Номер раздела, темы	Наименование раздела, темы	Наименование лабораторной работы	Норматив времени, час.
7 семестр			
1	Методы квантовой химии	Ознакомление с программами квантовой химии	2
		Геометрия молекул	4
2	Стандартные неэмпирические и полуэмпирические расчеты	Неэмпирический расчет структуры и свойств молекул	4
		Полуэмпирический расчет структуры и свойств молекул	3
		Рубежный контроль №1	1
3	Расширенные методы расчета	Оценка энергии корреляции молекул	4
		Исследование ППЭ молекул	4
4	Спектральные, термодинамические, реакционные свойства молекул	Расчет ИК-спектров	4
		Расчет термодинамических характеристик	4
		Расчет электронных спектров	3
		Рубежный контроль №2	1

5. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

При прослушивании лекций рекомендуется в конспекте отмечать все важные моменты, на которых заостряет внимание преподаватель, в частности те, которые необходимы для качественной подготовки к выполнению соответствующей лабораторной работы.

Залогом качественного выполнения лабораторных работ является самостоятельная подготовка к ним накануне путем повторения материалов лекций и проработке методических указаний к выполнению лабораторной работы. Рекомендуется подготовить вопросы по неясным моментам и обсудить их с преподавателем в начале лабораторной работы.

Преподавателем запланировано применение на лабораторных занятиях технологий развивающейся кооперации, коллективного взаимодействия, разбора конкретных ситуаций. Поэтому приветствуется групповой метод выполнения лабораторных работ.

Для текущего контроля успеваемости преподавателем используется балльно-рейтинговая система контроля и оценки академической активности. Поэтому настоятельно рекомендуется тщательно прорабатывать материал дисциплины при самостоятельной работе, участвовать во всех формах обсуждения и взаимодействия, как на лекциях, так и на лабораторных занятиях в целях лучшего освоения материала и получения высокой оценки по результатам освоения дисциплины.

Выполнение самостоятельной работы подразумевает самостоятельное изучение разделов дисциплины, подготовку к лабораторным занятиям, к рубежным контролям подготовку к зачету.

Рекомендуемая трудоемкость самостоятельной работы представлена в таблице:

Рекомендуемый режим самостоятельной работы

Наименование вида самостоятельной работы	Рекомендуемая акад. час трудоемкость,	
Углубленное изучение тем дисциплины:	24	
Методы квантовой химии	8	
Стандартные неэмпирические и полуэмпирические расчеты	4	
Расширенные методы расчета	6	
Спектральные, термодинамические, реакционные свойства молекул	6	
Подготовка к лабораторным занятиям (по 2 часа на каждое занятие)	16	
Подготовка к рубежным контролям (по 4 часа на каждый рубеж)	8	
Подготовка к зачету	18	
Всего за 7 семестр:	66	

6. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

6.1. Перечень оценочных средств

1. Балльно-рейтинговая система контроля и оценки академической активности студентов в КГУ.
2. Отчеты студентов по лабораторным работам.
3. Банк тестовых заданий к рубежным контролям № 1, 2
4. Перечень заданий к зачету.

6.2. Система балльно-рейтинговой оценки работы студентов по дисциплине

№	наименование	Содержание							
		<i>Распределение баллов за 7 семестр</i>							
		Вид УР:	Лекции		Выполнение и защита отчетов по лабораторным работам.		Рубежный контроль №1	Рубежный контроль №2	зачет
1	Распределение баллов за семестр по видам учебной работы, сроки сдачи учебной работы (при необходимости)	Балльная оценка:	До 2 баллов		6 баллов за 4-часовую	-	7	7	30
		Примечания:	4*2=8		6*8=48	-	7	7	
		60 и менее баллов – неудовлетворительно; незачтено 61...73 – удовлетворительно; зачтено 74... 90 – хорошо; 91...100 – отлично							
2	Критерий пересчета баллов в традиционную оценку по итогам работы в семестре и экзамена								

3	Критерий допуска к промежуточной аттестации по дисциплине (зачет, экзамен), возможности получения автоматического зачета (экзаменационной оценки) по дисциплине	<p>Для допуска к промежуточной аттестации (зачету) студент должен набрать по итогам текущего и рубежного контроля не менее 50 баллов и должен выполнить все лабораторные работы, рубежные контроли. Для получения экзаменационной оценки «автоматически» студенту необходимо набрать за семестр следующее минимальное количество баллов:</p> <ul style="list-style-type: none"> - 61 балл для получения зачета «автоматически» <p>По согласованию с преподавателем студенту могут быть добавлены дополнительные (бонусные) баллы за активное участие в научной работе, оригинальность принятых решений в ходе выполнения лабораторных работ, за участие в значимых учебных и внеучебных мероприятиях кафедры.</p>
4	Формы и виды учебной работы для неуспевающих (восстановившихся на курсе обучения) студентов для получения недостающих баллов в конце семестра	<p>В случае если к промежуточной аттестации набрана сумма менее 50 баллов, студенту необходимо набрать недостающее количество баллов за счет выполнения дополнительных заданий, до конца последней (зачетной) недели семестра. При этом необходимо проработать материал всех пропущенных лабораторных работ.</p> <p>Формы дополнительных заданий (назначаются преподавателем):</p> <ul style="list-style-type: none"> - выполнение и защита пропущенных лабораторных работ (при невозможности дополнительного проведения лабораторной работы преподаватель устанавливает форму дополнительного задания по тематике пропущенной лабораторной работы самостоятельно) – до 4-х баллов; - прохождение рубежного контроля (баллы в зависимости от рубежа). <p>Ликвидация академических задолженностей, возникших из-за разности в учебных планах при переводе или восстановлении, проводится путем выполнения дополнительных заданий, форма и объем которых определяется преподавателем.</p>

6.4. Примеры оценочных средств для рубежных контролей и зачета.

Пример тестовых заданий для рубежного контроля

7 семестр

Рубежный контроль № 1

Адиабатическое приближение. ППЭ. Молекулярная структура

1. Основой для введения адиабатического приближения служит

- малая величина кинетической энергии электронов

- электронная волновая функция
- медленно меняющаяся функция ядерных координат
- большая масса ядер по сравнению с массой электронов
- малая величина кинетической энергии ядер
- слабое электростатическое взаимодействие между электронной и ядерной подсистемами

2. Размерность ППЭ молекулы ацетилена

Введите ответ числом:

3. Размерность ППЭ молекулы бензола

Введите ответ числом:

4. Число независимых геометрических параметров, необходимых для ядерного уравнения молекулы этилена

Введите ответ числом:

5. В приближении Борна-Оппенгеймера в гамильтониан электронного уравнения входят следующие члены

- оператор кинетической энергии электронов
- оператор кинетической энергии ядер
- оператор потенциальной энергии отталкивания электронов
- оператор электростатического взаимодействия электронов с ядрами

6. Адиабатическое приближение может плохо выполняться

- в нежестких молекулах
- в электронно-возбужденных молекулах
- в радикалах
- в случае близкого по энергии расположения электронных состояний
- при близости по энергии колебательных и электронных переходов

7. Процесс изомеризации в квантово-химическом описании представляет собой

- переход системы из одного минимума на ППЭ в другой
- переход системы на соседнюю ППЭ
- изменение формы ППЭ
- процесс, не приводящий к движению изображающей точки системы по

8. Число вырожденных по энергии конформеров у молекулы этана

Введите ответ числом:

9. Процесс внутреннего вращения в молекуле этана представляет собой

- переход системы из одного минимума на ППЭ в другой
- переход системы на соседнюю ППЭ
- изменение формы ППЭ
- процесс, не приводящий к движению изображающей точки системы по ППЭ

10. Конформеры молекулы

- различаются по положению изображающей точки на ППЭ
- могут иметь разные химические свойства
- имеют разный состав
- имеют разное геометрическое строение

Электронная корреляция и методы её учёта

1. Размерная согласованность выполняется в методах

- RHF
- CIS
- FCI (полное KB)
- CISD
- MP2

2. По сравнению с методом RHF расчет молекулы бензола методом CIS в том же базисе

- увеличит энергию системы
- уменьшит энергию системы
- не изменит энергию системы
- приведет к непредсказуемому результату

3. Основаны на вариационном принципе

- RHF
- MP2
- МКССП
- KB
- MP3

4. Наиболее полный учет электронной корреляции возможен в методе

- MP4
- MP2
- FCI (полное KB)
- MINDO/3
- RHF

5. Энергия электронной корреляции

- всегда положительна
- всегда отрицательна
- характеризует отталкивание ядер
- характеризует мгновенное кулоновское отталкивание электронов
- её модуль уменьшается по мере использования все более точной волновой функции

6. В методе Хартри-Фока электронная корреляция в основном не учитывается из-за

- численных ошибок метода
- использования вариационного принципа
- использования приближения независимых частиц
- ограниченного числа функций в базисном наборе

7. Существенно более точный учет электронной корреляции может быть достигнут путем

- повышения точности процедуры согласования
- использования более широких базисных наборов АО
- использования метода, дающего более точную волновую функцию
- использования вариационного принципа при расчете энергий

8. Существенно более точный учет электронной корреляции может быть достигнут с помощью

- методов, представляющих волновую функцию в виде нескольких детерминантов Слейтера
- теории возмущения
- вариационного принципа
- более широких базисных наборов АО

9. Многоконфигурационное приближение используется в методах

- RHF
- MP2
- конфигурационного взаимодействия

- МКССП
- АМ1

10. Последовательность увеличения степени учета электронной корреляции

1. UHF
2. FCI (полное KB)
3. CIS
4. RHF
5. CISD

Введите номера без
разделительных знаков:

Примерный перечень вопросов к экзамену 7 семестр

1. Модель молекулы. Гамильтониан молекулы.
2. Вариационный принцип. Волновая функция в методе Хартри. Уравнения Хартри.
3. Метод Хартри-Фока. Определитель Слэтера, Энергия молекулы в методе Хартри-Фока.
4. Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока.
5. Итерационная процедура решения уравнений Хартри-Фока.
6. Энергия корреляции и методы ее приближенной оценки.
6. Методы конфигурационного взаимодействия. Метод Меллера-Плессета.
7. Поверхность потенциальной энергии и ее критические точки.
8. Равновесная конфигурация молекулы. Методы и критерии оптимизации геометрии.
9. Силовые постоянные, частоты колебаний молекулы. Моделирование ИК-спектров.
10. Расчет термодинамических характеристик.
11. Возбужденные состояния. Электронные спектры.
12. Заряды на атомах и порядке связей. Методы расчета.
13. Реакционные центры. Энергия ионизации и энергия протонирования.
14. Граничные орбитали их состав в методе МОЛКАО. Связывающие и разрыхляющие орбитали

6.5. Фонд оценочных средств

Полный банк заданий для текущего, рубежных контролей и промежуточной аттестации по дисциплине, показатели, критерии, шкалы оценивания компетенций, методические материалы, определяющие процедуры оценивания образовательных результатов, приведены в учебно-методическом комплексе дисциплины.

7. ОСНОВНАЯ И ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ УЧЕБНАЯ ЛИТЕРАТУРА

7.1. Основная учебная литература

1. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия.- М.: Мир, 2001г., 519 с.
2. Грибов Л.А., Муштакова С.П. Квантовая химия: учебник. - М.: Гардарики, 1999 г., 390 с.
3. Соловьев М.Е., Соловьев М.М. Компьютерная химия.- М.: СОЛОН - Пресс, 2005 г., 536с.

Электронный ресурс КГУ

4. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учеб. Пособие. - М.: Издательство «Лань», 2019 г., 428 с.

7.2. Дополнительная учебная литература

1. Квантовохимические расчеты в органической химии и молекулярной спектроскопии/ К. Я. Бурштейн, П.П. Шорыгин. - М.: Наука, 1989. 104с. - ISBN 5-02-001321-8.
2. Е.С.Апостолова, А.И.Михайлюк, В.Г.Цирельсон. Квантово-химическое описание реакций. М.: РХТУ, 1999.- 61с.
3. В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. Теория строения молекул. Ростов: Феникс, 1997.

Электронный ресурс КГУ

4. В.Г.Цирельсон. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. М. Лаборатория знаний, 2017.- 522с.

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ

- 1.Б.С. Воронцов. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ к лабораторным работам по курсу «Квантовая химия» для направления подготовки фундаментальная и прикладная химия. КГУ каф физики (на правах рукописи) 2018 год

9. РЕСУРСЫ СЕТИ «ИНТЕРНЕТ», НЕОБХОДИМЫЕ ДЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

№	Интернет-ресурс	Краткое описание
1	http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/	Сайт General Atomic and Molecular Electronic Structure System (GAMESS)
2	http://www.qchem.ru/lectures/	Описание программ, реализующих расчеты методом МО
3	chemport.ru	Форум химиков
4	http://elementy.ru	Энциклопедический сайт
5	http://quant.distant.ru/gallery.htm	сайт кафедры квантовой химии РХТУ им. Д.И. Менделеева
6	http://www.ph4s.ru/book_him_kvant.html	Обзор книг по квантовой химии
7	http://en.edu.ru/	Портал является составной частью федерального портала "Российское образование". Содержит ресурсы и ссылки на ресурсы по естественно - научным дисциплинам (физика, математика, химия и биология).
8	http://www.edu.ru/	Федеральный портал «Российское образование»
9	http://ru.wikipedia.org	Энциклопедия Википедия
10	http://www.msu.ru	Сайт Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова

10. ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ, ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ СПРАВОЧНЫЕ СИСТЕМЫ

1. ADF and band, SCM Home Page
2. ADF User's Guide
3. Alchemy 2000
4. CCL - Computational Chemistry Archives
5. CCSIR (Chemistry Software and Information Resources Project , pronounced caesar)
6. Chem3D: CambridgeSoft Corp. the version of the SMOG program at
7. ChemSymphony Lite
8. ChemSymphony Lite (currently unavailable)
9. EMERGE's PDF Zone
10. Gaussian, Inc. Homepage
11. gOpenMol
12. Home Page of SARA HPCN-Services
13. HyperChem 5
14. Linux for Pentium Pro
15. misc.
16. MOL2MOL (format converter)
17. MOLCAS
18. Molden (You need an Xwindow emulator)
19. MolMol for visualization of proteins
20. PC GAMESS (Ames Lab)
21. PC GAMESS (MSU)
22. POV-Ray
23. QCPE Main
24. RamVib, molden, and TransFreq.

25. Sculpt
26. SwissPDB
27. The 3D into 2D models converter
28. the demo site of the CORINA program to build 3D coordinates of small molecules
29. Theory, Modeling and Simulation
30. Vibratio
31. WebLab
32. WebLab ViewerPro 3.0 evaluation copy
33. Xpdf: a PDF viewer for X:
34. Xvibs (version 4) by Bradley A. Smith

Информационные системы

1. Alta Vista
2. American Institute of Physics: The Physics Information NETsite
3. CNN Homepage
4. CNN Travel Guide - City Guides
5. CNN weather forecast
6. Interfax News Agency
7. Netlib
8. Northwestern University: NUInfo
9. Russia on the Web
10. Russian Web servers at the MSU homepage
11. Sandy - Puls
12. Scientific Questions and Answers Database
13. Search BIBSYS
14. Springer Chemical Online Library
15. Uncover Query Screen
16. WebChemistry
17. Welcome to WhoWhere?
18. World Currency Exchange

11. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

1. Специализированная аудитория (компьютерный класс),
2. Мультимедийные средства,
3. Набор презентаций по темам лекций

Аннотация к рабочей программе дисциплины
«Квантовая химия»

образовательной программы высшего образования –
программы специалитета

**04.05.01 – Фундаментальная и прикладная химия.
Направленность (профиль) Аналитическая химия.**

Трудоемкость дисциплины: 3 ЗЕ (108 академических часов)
Семестры: 7 (очная форма обучения)
Форма промежуточной аттестации: зачет

Содержание дисциплины

Ограниченный и неограниченный методы Хартри-Фока. Электронная корреляция. Методы конфигурационного взаимодействия. ППЭ молекул и реакций. Моделирование спектральных характеристик.