

АННОТАЦИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Дисциплина (модуль)	Квантово-химические расчеты в теоретической химии Б1.В.ДВ7				
Содержание	<p>Раздел 1. Основы квантовой механики. Операторы основные понятия и определения. Свойства волновой функции. Решение уравнений на собственные значения. Стационарные системы в микромире. Решение уравнения Шредингера для частицы в потенциальном барьере. Решение уравнения Шредингера для квантового ротатора.</p> <p>Раздел 2. Квантово-механическое описание атомных систем.. Приближенные методы решения уравнения Шредингера. Метод Хартри-Фока. Квантово-механическое описание молекулярных систем. Приближение Рутана. Полуэмпирические методы расчета электронной структуры молекул. Неэмпирические методы расчета. Группы симметрии. Теория групп и правила отбора. Квантово-химическое описание элементарного акта химической реакции.</p>				
Реализуемые компетенции	ОК-6, ОПК-1, ПК-2, ПК-3, ПК-15, ППК-21				
Результаты освоения дисциплины (модуля)	<p>В результате освоения дисциплины обучающийся должен:</p> <p>Знать: основные физические законы, закономерности свойств объектов микромира; качественные отличия в поведении объектов микромира по отношению к макрообъектам; специфику описания состояния и свойств микрочастиц и систем микрочастиц; применение методов квантовой механики к описанию электронной структуры атомных и молекулярных систем; основные закономерности электронного строения атомов и молекул; об основных методах расчета электронной структуры атомов и молекул; об основных способах и методах описания химических и физико-химических свойств атомов и молекул на основе их электронного строения.</p> <p>уметь: интерпретировать экспериментальные данные химии (свойства атомов, молекул, закономерности химических процессов) на основе положений и закономерностей квантовой механики и квантовой химии; применять полученные знания для решения задач исследовательского и прикладного характера; сопоставлять результаты квантовой химии с экспериментальными химическими и физико-химическими данными.</p> <p>владеть: полуэмпирическими методами расчета электронной структуры молекул, исходя из их возможностей;</p>				
Трудоемкость, з.е.	3				
Объём занятий, часов	108	Лекций	Практических (семинарских занятий)	Лабораторных занятий	Самостоятельная работа
	Всего	34	17	17	40
	В том числе в интерактивной форме	4			

Формы самостоятельной работы студентов	Зачёт в 7 семестре
Формы отчетности (в т.ч. по семестрам)	Самостоятельная подготовка к темам практических занятий

Зав.кафедрой химии



Г.М. Абакаров

Декан ТФ



Н.Л.Баламирзоев