

**АННОТАЦИЯ**  
**дисциплины «Б1.В.ДВ.04.01 Квантовая химия»**

**Объем трудоемкости:** Общая трудоёмкость дисциплины составляет 4 зачетные единицы (144 часов, из них – 84,3 контактных часа: лекционных 28 часов, практических 56 часов, 0,3 часа ИКР; 33 часа самостоятельной работы, 26,7 часа контроль)

**Цель дисциплины:**

Познакомить студентов с возможностями квантовой химии для решения химических задач и привить им навыки работы с основными положениями квантовой химии.

**Задачи дисциплины:**

- Научить студентов применению методов квантовой химии для решения химических задач, компьютерного моделирования структур молекул и химических процессов.
- Научить грамотно применять полученные знания при решении ряда задач, возникающих при исследованиях неорганических молекул, определение симметрии возможной геометрической конфигурации молекулы, типов химической связи.

**Место дисциплины в структуре ООП ВО**

Дисциплина «Квантовая химия» относится к дисциплинам по выбору вариативной части Блока Б1 учебного плана направления 04.04.01 Химия, направленность «Неорганическая химия».

Знания и навыки, полученные в результате освоения данного курса, могут быть использованы при решении различных задач общеобразовательных и специальных химических дисциплин, в научно-исследовательской работе студентов.

**Требования к уровню освоения дисциплины**

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
1.	ОПК-2	владением современными компьютерными технологиями при планировании исследований, получении и обработке результатов научных экспериментов, сборе, обработке, хранении, представлении и передаче научной информации	закономерности и применения квантово-механических моделей при теоретических расчетах	подбирать параметры построения молекулярных моделей	основными методами квантово-механических расчетов молекулярных моделей

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
2.	ПК-1	способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты	основные методы теоретических расчетов, применяемых в квантовой химии	самостоятельно проводить компьютерные расчеты по известным методикам квантовой химии	навыками теоретических квантово-механических расчетов
3.	ПК-4	способностью участвовать в научных дискуссиях и представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати)	формулировки основных теорем квантовой химии и основных методов компьютерного расчета молекулярного моделирования	приобретать новыми знаниями из теоретических расчетов, а также путем литературного поиска и использования современных информационных образовательных технологий	навыками использования квантово-химических знаний и умений в практической деятельности

### Основные разделы дисциплины:

Разделы дисциплины, изучаемые в семестре В (для студентов ОФО)

№ раздела	Наименование разделов	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			СРС
			Л	ПЗ	ЛР	
1	2	3	4	5	6	7
1	Строение атома. Одноэлектронный атом. Многоэлектронные атомы.	18	4	6		8
2	Теория химической связи.	38	10	20		8
3	Типы химической связи.	32	10	14		8
4	Методы расчетов.	29	4	16		9
	<i>Всего:</i>	117	28	56		33

**Курсовые работы:** не предусмотрены

**Форма проведения аттестации по дисциплине:** экзамен в семестре В.

**Основная литература:**

1. Холанд А. Молекулы и модели: молекулярная структура соединений элементов главных групп / пер.с англ. Г.В. Гиричева, Н.И. Гиричевой. – М.:URSS : [КРАСАНД], 2011. – 382 с.
2. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для студентов вузов. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. – 495 с.

Автор РПД

Панюшкин В.Т.