

АННОТАЦИЯ
рабочей программы дисциплины
Б1.О.09 «Компьютерная химия»

Направление подготовки/специальность: 04.04.01 – Химия, профиль «Перспективные соединения и материалы на их основе».

Объем трудоемкости: 4 зачетных единицы (144 часа, из них контактных 48,2 часа: лекционных 16 ч., лабораторных 32 ч., ИКР 0,2 часа, 95,8 часов самостоятельной работы).

Цель дисциплины: познакомить студентов с возможностями математического моделирования в химии, его применения для решения химических задач и привить им навыки работы с соответствующим программным обеспечением.

Задачи дисциплины:

- научить студентов применению методов математического моделирования для решения химических задач, компьютерного моделирования структур молекул и химических процессов
- научить грамотно применять полученные знания при решении ряда задач, возникающих при исследованиях строения молекул. Например: классификация электронных термов атомов и молекул; определение симметрии нормальных колебаний молекулы и их активности в ИК и КР спектрах; определение симметрии возможной геометрической конфигурации молекулы и т.д.

Место дисциплины в структуре образовательной программы

Курс «Компьютерная химия» относится к обязательной части Блока 1 «Дисциплины (модули)» (Б1.О.09). Для его изучения необходимо предварительное изучение курсов бакалавриата «Неорганическая химия», «Кристаллография» и «Строение вещества».

Знания и навыки, полученные в результате освоения данного курса, могут быть использованы при решении различных задач общеобразовательных и специальных химических дисциплин, изучении дисциплин Электронная и колебательная спектроскопия, Теоретические закономерности и стратегия синтеза новых материалов, в научно-исследовательской работе студентов.

Требования к уровню освоения дисциплины

Изучение данной учебной дисциплины направлено на формирование у обучающихся следующих компетенций: ОПК-3 - Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности.

Основные разделы дисциплины: строение атома, одноэлектронный атом, многоэлектронные атомы, теория химической связи, электронная корреляция, теория функционала плотности, методы расчетов.

Курсовые работы: не предусмотрены.

Форма проведения аттестации по дисциплине: зачет.

Автор: канд. хим. наук, доц. Волынкин В.А.