

АННОТАЦИЯ
дисциплины Б1.В.ДВ.01.02

«Компьютерное моделирование структур молекул и химических процессов»
направление подготовки 04.04.01 – Химия (профиль Неорганическая химия)

Объем трудоемкости: 5 зачетных единиц (180 часов, из них контактных 72,5 часа: лекционных 36 ч., лабораторных 36 ч., ИКР 0,5 часа, 80,8 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 «Компьютерное моделирование структур молекул и химических процессов» относится к вариативной части Блока Б1 «Дисциплины (модули)» (Б1.В.ДВ.01.02). Для его изучения необходимо предварительное изучение курсов бакалавриата Б1.Б.12 Неорганическая химия, Б1.Б.09 «Кристаллография» и Б1.В.03 «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 Компьютерное моделирование структур молекул и химических процессов, Молекулярная спектроскопия координационных соединений, в научно-исследовательской работе студентов.

Требования к уровню освоения дисциплины

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций: ОК-1, ОПК-1, ПК-1.

перечислить компетенции

№ п.п.	Индекс компетенции	Содержание компетенции (или её части)	В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны		
			знать	уметь	владеть
1	ОК-1	способностью к абстрактному мышлению, анализу, синтезу	основные приемы анализа и синтеза, основные категории формальной логики	абстрактно мыслить, использовать методы анализа и синтеза в научной работе, соотносить теоретические положения с эксперименталь-	способностью анализировать разнородные экспериментальные факты, обобщать значительное число данных, осмыслять теоретические положения

				ными данными	
2	ОПК-1	способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	Основные понятия квантовой химии, используемые при изучении атомных и молекулярных систем	грамотно применять полученные знания при решении ряда задач, возникающих при исследованиях строения молекул.	Методологией квантовой химии и ее приложений к изучению атомных и молекулярных систем
3	ПК-1	способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты	Основные принципы планирования научного исследования.	самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты	приемами осмысления базовой и факультативной информации для решения научно-исследовательских и производственных задач в сфере профессиональной деятельности

Основные разделы дисциплины:

Разделы дисциплины, изучаемые в 9 семестре (для студентов ОФО)

№	Наименование разделов (тем)	Количество часов				
		Всего	Аудиторная работа			Внеаудиторная работа
			Л	ПЗ	ЛР	
1	2	3	4	5	6	7
1.	Строение атома. Одноэлектронный атом. Многоэлектронные атомы.	22	4		2	16
2.	Теория химической связи.	48	12		12	24
3.	Электронная корреляция. Теория функционала плотности.	46	10		12	24
4.	Методы расчетов.	36,8	10		10	16,8
Итого по дисциплине:		152,8	36		36	80,8

Курсовые работы: *не предусмотрены*

Форма проведения аттестации по дисциплине: зачет и экзамен в 9 семестре.

Основная литература:

1. Цирельсон, В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] : учебное пособие / В.Г. Цирельсон. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 522 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94104>
2. В. Г. Цирельсон. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учебное пособие для студентов вузов М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. - 495 с.

Автор (ы) РПД Волынкин В.А.
Ф.И.О.