

**АННОТАЦИЯ**  
**дисциплины «Б1.В.ДВ.04.02 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:**  
формирование знаний и умений в области использования ЭВМ для решения различных химических проблем

**Задачи дисциплины:**

Познакомить студентов с

- основными направлениями использования компьютеров в химии, возможностями и недостатками основных химических программных пакетов;
- методиками проведения квантово-химических расчетов с использованием готовых прикладных программ;
- перспективами развития программных продуктов вычислительной квантовой химии.

**Место дисциплины в структуре ООП ВО**

Дисциплина «Компьютерная 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	основные направления использования компьютеров в химии	осуществить методику расчетов молекулярных и геометрических характеристик молекул различными методами квантовой химии в рамках прикладных пакетов	навыками работы с прикладными пакетами

№ 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	Введение. Применение ЭВМ в квантовой химии	18	4	6		8
2	Применение ЭВМ в химической кинетике и термодинамике	38	10	20		8
3	Применение ЭВМ в органической химии	32	10	14		8
4	Применение ЭВМ в аналитической химии	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. Соловьев М.М., Соловьев М.Е. Компьютерная химия. М.: Изд. Солон, 2005.—536с.

Автор РПД

Панюшкин В.Т.