

# АННОТАЦИЯ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

## Квантовая химия

Направление подготовки 04.04.01 – Химия

3 семестр

### 1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель освоения дисциплины «Квантовая химия»: формирование у обучающихся общетеоретических представлений о физических основах методов квантовой химии, знакомство в необходимых пределах с математическим аппаратом квантовомеханической теории и разъяснение смысла вводимых при этом понятий.

### 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП

Дисциплина «Квантовая химия» изучается в вариативной части учебного плана.

Пререквизиты дисциплины «Квантовая химия»: 1. Математика. 2. Информатика. 3. Обработка результатов химического эксперимента. 4. Численные методы в химии. 5. Системное моделирование химических процессов. 6. Общая и неорганическая химия. 7. Физика (некоторые аспекты обработки эксперимента).

### 3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

В процессе освоения данной дисциплины студент формирует и демонстрирует следующие компетенции (ОПК-1, ОПК-2, ПК-5):

*Знать*: основные понятия квантовой механики, лежащие в основе квантовохимических представлений, суть математического описания стационарных молекулярных систем и методов решения соответствующего уравнения Шрёдингера, методы численного решения угловой и радиальной части уравнения Шрёдингера;

*Уметь*: профессионально пользоваться основными теоретическими понятиями квантовой химии, разбираться в основных методиках приближённого решения квантовомеханических задач;

*Владеть*: общетеоретической методикой квантовомеханического описания микромира, основами методик построения квантовохимического описания атомов и молекулярных систем, основными численными методами решения прикладных задач квантовой химии.

### 4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Теоретические аспекты квантовой химии. Волновая функция. Физический смысл волновой функции. Описание квантовомеханических величин с помощью операторов. Операторы основных физических величин. Гамильтониан. Уравнение Шрёдингера. Стационарное уравнение Шрёдингера. Водородоподобные атомы. Уравнение Шрёдингера в сферических координатах. Решение R-уравнения. Решение Ф-уравнения. Решение  $\Theta$ -уравнения. Численный расчёт радиальной и угловой функций и атомных орбиталей в целом для различных квантовых чисел.

### 5. ВИД АТТЕСТАЦИИ – зачёт.

**6. КОЛИЧЕСТВО ЗАЧЕТНЫХ ЕДИНИЦ** – 4 зачетные единицы, 144 часов.

Составитель: доцент кафедры химии Лобко В.Н. *Л*

Заведующий кафедрой химии Кухтин Б.А. *Кухтин*

Председатель учебно-методической комиссии

направления 04.04.01 – “Химия” Кухтин Б.А. *Кухтин*

Директор ИБЭ Смирнова Н.Н. *Смирнова*

Дата: *03.09.2018*

Печать института

