

АННОТАЦИЯ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Квантовохимические основы строения атомов и молекул

Направление подготовки 04.04.01 – Химия

3 семестр

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель освоения дисциплины «Квантовохимические основы строения атомов и молекул»: 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 «Квантовохимические основы строения атомов и молекул» изучается в вариативной части учебного плана.

Пререквизиты дисциплины «Квантовохимические основы строения атомов и молекул»: 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 Θ-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.



Заведующий кафедрой химии Кухтин Б.А.



Председатель учебно-методической комиссии

направления 04.04.01 – “Химия” Кухтин Б.А.



Директор ИБЭ Смирнова Н.Н.

Дата: 03.09.2018

Печать института

