

АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ
КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Направление подготовки (специальность)	04.04.01 «Химия»
Направленность (профиль) подготовки	Химия окружающей среды, химическая экспертиза и экологическая безопасность
Цель освоения дисциплины	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.
Общая трудоемкость дисциплины	4 зачетные единицы, 144 часа
Форма промежуточной аттестации	Зачет
Краткое 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 Φ -уравнения. Решение Θ -уравнения Численный расчёт радиальной и угловой функций и атомных орбиталей в целом для различных квантовых чисел

Аннотацию к рабочей программе составил:
Д.х.н., проф. кафедры химии

Б.А. Кухтин