

АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ
КВАНТОВАЯ ХИМИЯ В ОРГАНИЧЕСКОМ СИНТЕЗЕ

Направление подготовки (специальность)	04.04.01 – Химия
Направленность (профиль) подготовки	Химия фармацевтических препаратов и биологически активных веществ
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	Зачёт
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. Численный расчёт радиальной и угловой функций и атомных орбиталей в целом для различных квантовых чисел.

Аннотацию рабочей программы составил



Лобко В.Н.
доцент кафедры химии