

**АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ**  
**ПРИМЕНЕНИЕ РАСЧЁТНЫХ И КВАНТОВОХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ В**  
**ОРГАНИЧЕСКОМ СИНТЕЗЕ**

<b>Направление подготовки (специальность)</b>	04.04.01 – Химия
<b>Направленность (профиль) подготовки</b>	Химия фармацевтических препаратов и биологически активных веществ
<b>Цель освоения дисциплины</b>	Освоение слушателями системного подхода к решению конкретных задач химической технологии и органического синтеза, моделирования и оптимизации химико-технологических процессов, а также 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.
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b>	4 зачетные единицы, 144 часа
<b>Форма промежуточной аттестации</b>	Зачёт
<b>Краткое содержание дисциплины:</b>	Одномерная оптимизация химико-технологических процессов органической химии. Методы многомерной оптимизации в органической химии. Метод покоординатного спуска. Метод градиентного спуска. Теоретические аспекты квантовой химии. Волновая функция. Физический смысл волновой функции. Уравнение Шрёдингера. Стационарное уравнение Шрёдингера. Численный расчёт атомных орбиталей и его применение в органической химии.

Аннотацию рабочей программы составил



Лобко В.Н.  
доцент кафедры химии