

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

Направление подготовки (специальность)	04.04.01 – Химия
Направленность (профиль) подготовки	Химия фармацевтических препаратов и биологически активных веществ
Цель освоения дисциплины	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.
Общая трудоемкость дисциплины	4 зачетные единицы, 144 часа
Форма промежуточной аттестации	Зачёт
Краткое содержание дисциплины:	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
23.06.2022



Лобко В.Н.
доцент кафедры химии